

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ
À L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES

COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAÎTRISE EN PHYSIQUE

PAR
JOHAN STROHMEIER

**ÉTUDE NUMÉRIQUE ET ANALYTIQUE DES
PROPRIÉTÉS DES TORCHÈRES
D'HYDROGÈNE DANS UN MILIEU VENTEUX**

Novembre 2011

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

Avant-propos

Ce projet n'aurait pas abouti sans l'aide et la contribution de plusieurs personnes à qui je souhaite adresser mes remerciements les plus sincères.

Je tiens à remercier en premier lieu mon directeur de recherche, M. Pierre Bénard, pour m'avoir accueilli et accepté dans son groupe de recherche ainsi que pour ses encouragements et ses conseils avisés. Un grand merci à M. Bénard pour le soutien financier qui m'a été offert. Mes remerciements s'adressent également à mon co-directeur, M. Ahmed Hourri, pour avoir été toujours à l'écoute et disponible tout au long de la réalisation de ce projet et pour toutes ses bonnes idées et sa collaboration.

Je n'oublie pas tous les étudiants du groupe de recherche pour l'excellente ambiance de travail et tous les employés de l'Institut de Recherche sur l'Hydrogène ainsi que tous mes amis.

Ma gratitude s'adresse aussi à mes proches et à toute ma famille pour leur encouragement. Enfin, j'aimerais remercier tout spécialement ma femme Sandra, ma fille Liana et mon fils Jacob qui m'ont toujours accompagné et encouragé.

Résumé

La présente étude a pour objectif de déterminer la radiation thermique issue de torchères d'hydrogène présentes dans un milieu venteux par l'utilisation d'outils analytique et numérique. Le premier outil est le modèle analytique de Chamberlain (1987) développé au centre de recherche de Shell à Thornton et le second outil est numérique, le logiciel commercial de la dynamique des fluides ANSYS FLUENT. Ils ont directement été comparés à l'aide de scénarios choisis parmi des mesures expérimentales obtenus par Health & Safety Laboratory (HSL) à Buxton en Angleterre, non accessibles dans ce document. Ces scénarios sont caractérisés par un jet d'hydrogène subsonique et par la présence d'un vent dans le domaine, éléments ayant un impact direct sur la flamme d'hydrogène.

À Sandra, Liana & Jacob

Table des matières

Avant-propos	ii
Résumé	iii
Table des matières	vi
Table des figures	x
Liste des tableaux	xi
1 Introduction	1
1.1 Énergie et hydrogène	1
1.2 Les torchères	3
2 Radiation thermique	6
2.1 Méthodes de calcul de la radiation thermique	6
2.2 Modèle de la source ponctuelle	7
2.3 Modèle de la flamme solide	10
2.3.1 Présentation du modèle de Chamberlain (1987)	10
2.3.2 Calcul de la radiation thermique	12
Pouvoir émissif surfacique	12
Facteur de forme	13
Facteur de transmissivité	13
Aire du cône tronqué	14
3 Modélisation	19
3.1 Type de solveurs	19
3.1.1 Solveur « pressure-based »	20
Algorithme « segregated »	20
Algorithme « coupled »	21
3.1.2 Solveur « density-based »	22
3.2 Équations de la mécanique des fluides	24
3.2.1 Équation de la conservation de la masse	24

3.2.2	Équation de la conservation de la quantité de mouvement	24
3.2.3	Équation de la conservation de l'énergie	24
3.3	Modèle de turbulence	25
3.3.1	Équations de transport du modèle k - ϵ réalisable	26
3.3.2	Viscosité turbulente	26
3.3.3	Constantes du modèle	27
3.3.4	Spécification des paramètres de la turbulence	27
3.3.5	Génération de la turbulence	28
3.3.6	Effets de la flottabilité de la turbulence	28
3.3.7	Effets de la compressibilité sur la turbulence	29
3.3.8	Chaleur de convection et transfert de masse	30
3.4	Transport des espèces et réactions	30
3.4.1	Équation de transport des espèces	30
3.4.2	Diffusion de la masse dans les fluides turbulents	31
3.4.3	Formulation « generalized finite-rate »	31
	Le modèle « laminar finite-rate »	32
3.5	Modèle de radiation	33
3.5.1	Équation de transfert radiatif	34
3.5.2	Modèle P-1	34
3.5.3	Conditions aux frontières pour le modèle P-1	35
4	Résultats	37
4.1	Validation du modèle de combustion	38
4.2	Torchères d'hydrogène et radiation thermique	41
4.2.1	Compilation du modèle de Chamberlain	41
4.2.2	Présentation des scénarios étudiés	42
4.2.3	Méthodologie adoptée avec FLUENT	43
4.2.4	Résultats	43
	Scénario 1 : débit d'hydrogène de 40 g/s	43
	Scénario 2 : débit d'hydrogène de 80 g/s	54
	Scénario 3 : débit d'hydrogène de 200 g/s	61
5	Conclusion	69
	Bibliographie	72
A	Configuration de FLUENT	73
A.1	Configuration générale	73
A.2	Choix des modèles	73
A.3	Conditions frontières	79
A.4	Gestion de la simulation	83

Table des figures

2.1	Configuration du modèle de la source ponctuelle ^[10]	7
2.2	Longueur de la flamme en fonction de la puissance calorifique liée au débit à l'orifice (API RP 521, 1997).	9
2.3	Représentation de la flamme d'une torchère dans le modèle de Chamberlain (1987).	11
2.4	Étapes principales du modèle théorique de Chamberlain (1987)	11
2.5	Représentation des paramètres intervenant dans le calcul du facteur de forme dans le cas d'une sphère.	13
3.1	Résumé du solveur « pressure-based » : algorithme « segregated » et « coupled ».	21
3.2	Résumé du solveur « density-based ».	23
4.1	Domaine de calcul et plan central montrant le profil de température pour une flamme de H_2 -air incompressible et turbulente par W.G. Houf, G.H. Evans et R.W. Schefer ; $Re_d = 10000$. ^[7]	38
4.2	Température de la flamme le long de la ligne centrale verticale pour une flamme de H_2 -air incompressible et turbulente par W.G. Houf, G.H. Evans et R.W. Schefer ^[7]	39
4.3	Distribution de la température du jet sur la ligne centrale pour une flamme de H_2 -air compressible et turbulente obtenue avec FLUENT.	40
4.4	Contours de températures sur le plan central obtenus avec FLUENT.	40
4.5	Configurations représentant les 3 types de résultats donnés par l'application logicielle basée sur le modèle du Chamberlain.	41
4.6	Ligne virtuelle selon laquelle les résultats de la radiation thermique vont être comparés.	42
4.7	Domaine de simulation : a) domaine entier avec maillage des frontières visible b) coupe longitudinale le long de l'axe central avec maillage interne visible.	44
4.8	Les différentes étapes d'une simulation avec FLUENT.	45
4.9	Frontière du domaine par lequel le débit d'air (ou le vent) entre dans le domaine.	46

4.10	<i>Débit de 40 g/s</i> - Profil du vent sous forme de vecteur a) dans le domaine b) autour du tube sur le plan longitudinal.	46
4.11	<i>Débit de 40 g/s</i> - Distribution du vent sous forme de contour autour du tube sur le plan longitudinal.	47
4.12	<i>Débit de 40 g/s</i> - Intensité turbulente (%) sur le plan longitudinal. . . .	47
4.13	<i>Débit de 40 g/s</i> - Vecteur vitesse à la sortie du tube lors de la dispersion de l'hydrogène dans l'air.	48
4.14	<i>Débit de 40 g/s</i> - Distribution de la fraction molaire d'hydrogène sur le plan longitudinal du domaine.	49
4.15	<i>Débit de 40 g/s</i> - Représentation du contour de fraction molaire de 4% d'hydrogène.	49
4.16	<i>Débit de 40 g/s</i> - Représentation du contour de fraction molaire de 9% d'hydrogène.	50
4.17	<i>Débit de 40 g/s</i> - Profil de température sur le plan longitudinal.	50
4.18	<i>Débit de 40 g/s</i> - Contour de température de 1500 K.	50
4.19	<i>Débit de 40 g/s</i> - Profil de la radiation thermique incidente sur le plan longitudinal.	51
4.20	<i>Débit de 40 g/s</i> - Contour de radiation thermique incidente de a) 4 kW/m^2 et b) $12.6 kW/m^2$	51
4.21	<i>Débit de 40 g/s</i> - Résultats de la radiation thermique pour un débit d'hydrogène de 40 g/s.	53
4.22	<i>Débit de 80 g/s</i> - Profil du vent sous forme de vecteur a) dans le domaine b) autour du tube sur le plan longitudinal.	54
4.23	<i>Débit de 80 g/s</i> - Distribution du vent sous forme de contour autour du tube sur le plan longitudinal.	55
4.24	<i>Débit de 80 g/s</i> - Intensité turbulente (%) sur le plan longitudinal. . . .	55
4.25	<i>Débit de 80 g/s</i> - Vecteur vitesse à la sortie du tube lors de la dispersion de l'hydrogène dans l'air.	56
4.26	<i>Débit de 80 g/s</i> - Distribution de la fraction molaire d'hydrogène sur le plan longitudinal du domaine.	57
4.27	<i>Débit de 80 g/s</i> - Représentation du contour de fraction molaire de 4% d'hydrogène.	57
4.28	<i>Débit de 80 g/s</i> - Représentation du contour de fraction molaire de 9% d'hydrogène.	57
4.29	<i>Débit de 80 g/s</i> - Profil de température sur le plan longitudinal.	58
4.30	<i>Débit de 80 g/s</i> - Contour de température de 1500 K.	58
4.31	<i>Débit de 80 g/s</i> - Profil de la radiation thermique incidente sur le plan longitudinal.	59
4.32	<i>Débit de 80 g/s</i> - Contour de radiation thermique incidente de a) 4 kW/m^2 et b) $12.6 kW/m^2$	59

4.33	<i>Débit de 80 g/s</i> - Résultats de la radiation thermique pour un débit d'hydrogène de 80 g/s.	60
4.34	<i>Débit de 200 g/s</i> - Profil du vent sous forme de vecteur a) dans le domaine b) autour du tube sur le plan longitudinal	61
4.35	<i>Débit de 200 g/s</i> - Distribution du vent sous forme de contour autour du tube sur le plan longitudinal.	62
4.36	<i>Débit de 200 g/s</i> - Intensité turbulente (%) sur le plan longitudinal. . .	62
4.37	<i>Débit de 200 g/s</i> - Vecteur vitesse à la sortie du tube lors de la dispersion de l'hydrogène dans l'air.	63
4.38	<i>Débit de 200 g/s</i> - Distribution de la fraction molaire d'hydrogène sur le plan longitudinal du domaine.	63
4.39	<i>Débit de 200 g/s</i> - Représentation du contour de fraction molaire de 4% d'hydrogène.	64
4.40	<i>Débit de 200 g/s</i> - Représentation du contour de fraction molaire de 9% d'hydrogène.	64
4.41	<i>Débit de 200 g/s</i> - Profil de température sur le plan longitudinal. . . .	65
4.42	<i>Débit de 200 g/s</i> - Contour de température de 1500 K.	65
4.43	<i>Débit de 200 g/s</i> - Profil de la radiation thermique incidente sur le plan longitudinal.	66
4.44	<i>Débit de 200 g/s</i> - Contour de radiation thermique incidente de a) 4 kW/m^2 et b) 12.6 kW/m^2	67
4.45	<i>Débit de 200 g/s</i> - Résultats de la radiation thermique pour un débit d'hydrogène de 200 g/s.	68
A.1	Paramètres généraux de FLUENT.	74
A.2	Menu permettant d'accéder aux différents modèles de FLUENT.	74
A.3	Activation de l'équation d'énergie.	75
A.4	Sélection du modèle de turbulence $k-\epsilon$ réalisable.	76
A.5	Traitement des espèces chimiques lors de la dispersion de l'air et de l'hydrogène.	76
A.6	Traitement des espèces chimiques lors de la combustion de l'hydrogène dans l'air.	77
A.7	Activation du modèle de radiation P-1.	77
A.8	Modèles choisis lors de la combustion de l'hydrogène dans l'air.	78
A.9	Propriétés des espèces chimiques utilisées lors des simulations.	78
A.10	Présentation des différents types de frontières du domaine.	79
A.11	Configuration des frontières définies comme « pressure outlet ».	80
A.12	Configuration de la frontière générant le vent dans le domaine définie comme « mass flow inlet ».	81
A.13	Configuration du débit d'hydrogène défini comme « mass flow inlet ». .	82
A.14	Paramètres de discrétisation temporelle et spatiale.	83

A.15 Paramètres de contrôle de la solution.	84
A.16 Zone de définition des critères de convergence et de l’affichage moniteur en temps réel.	84
A.17 Zone d’initialisation de la simulation.	85
A.18 Choix du nombre d’itérations et démarrage de la simulation.	85

Liste des tableaux

1.1	Effets de la radiation thermique sur les équipements et les êtres humains.	4
4.1	Description des scénarios étudiés.	42
4.2	Résultats pour 40 g/s et 2".	52
4.3	Pourcentages d'écart pour la radiation thermique à plusieurs distances du tube entre le modèle de Chamberlain et FLUENT pour un débit de 40 g/s (SP : simple point, ESO : élément de surface oblique, ESH : élément de surface horizontal).	52
4.4	Résultats pour 80 g/s et 2".	58
4.5	Pourcentages d'écart pour la radiation thermique à plusieurs distances du tube entre le modèle de Chamberlain et FLUENT pour un débit de 80 g/s (SP : simple point, ESO : élément de surface oblique, ESH : élément de surface horizontal).	60
4.6	Résultats pour 200 g/s et 2".	66
4.7	Pourcentages d'écart pour la radiation thermique à plusieurs distances du tube entre le modèle de Chamberlain et FLUENT pour un débit de 200 g/s (SP : simple point, ESO : élément de surface oblique, ESH : élément de surface horizontal).	68

Chapitre 1

Introduction

1.1 Énergie et hydrogène

L'apparition du moteur à explosion et de l'électricité marque incontestablement le XIX^{ème} siècle. Les transformations économiques et sociales connues à travers le monde marquent alors le début de « l'ère industrielle » ainsi que le début de la « civilisation de l'automobile ». L'énergie fût le cœur de ce développement et elle le demeure encore aujourd'hui, c'est pourquoi les ressources naturelles de la planète sont exploitées sans limite : houille, pétrole, gaz naturel (les combustibles fossiles), hydraulique mais aussi l'énergie provenant du nucléaire. Cette surexploitation peut indéniablement conduire à des conséquences comme l'épuisement des ressources fossiles, l'accumulation de déchets nucléaires, la pollution atmosphérique menaçant la santé publique et l'effet de serre additionnel qui réchauffe la planète. D'autres facteurs comme l'augmentation de la population mondiale et le poids grandissant des pays en voie de développement sont à considérer quant à la croissance de la consommation énergétique mondiale ^[5].

Comment résoudre le problème de l'épuisement des carburants fossiles ? Comment combattre l'effet de serre et diminuer la pollution atmosphérique ? Il faut d'abord réduire la consommation d'énergie à un niveau rationnel d'utilisation, augmenter l'efficacité énergétique des installations et produits de consommations (chauffage, automobiles, etc.), utiliser les énergies renouvelables et utiliser de nouveaux carburants plus appropriés.

L'utilisation de l'hydrogène comme nouveau vecteur énergétique propre offre une solution aux questions énumérées précédemment. C'est un gaz non toxique et très énergétique capable de produire de la chaleur et de faire fonctionner des moteurs par

combustion directe (moteurs à combustion interne) avec de l'eau pure comme résidu. L'hydrogène ne se trouve dans la nature qu'à l'état combiné, surtout dans l'eau et les hydrocarbures. Il est donc nécessaire de le produire et comme l'électricité, il n'est pas une énergie mais plutôt un vecteur d'énergie. Il existe différentes manières de produire l'hydrogène. Trois grandes sources d'énergie primaire permettent cette production : les fossiles (gaz naturel...), le nucléaire (électrolyse et craquage de l'eau...) et les renouvelables (biomasse, solaire, éolien, hydraulique). Adopter l'hydrogène comme vecteur d'énergie demande de le produire, de le stocker (en particulier à bord des véhicules), de le distribuer et d'assurer la sécurité de son utilisation. Une importante mise en œuvre doit être envisagée et basée sur de nouvelles technologies, de gros investissements, et surtout sur une volonté politique.

L'hydrogène est le plus simple de tous les éléments chimiques. L'atome d'hydrogène est constitué d'un seul proton autour duquel gravite un seul électron. C'est l'élément le plus léger et le plus abondant dans l'univers. Il représente 75% en masse ou 90% en volume de toute la matière présente dans l'univers. Bien que l'hydrogène soit l'élément le plus abondant dans l'univers, il n'existe pratiquement pas à l'état pur. Sur la terre, on le trouve presque toujours lié chimiquement à d'autres éléments comme l'eau, la biomasse ou les combustibles fossiles. Il est néanmoins possible de l'isoler pour obtenir de l'hydrogène moléculaire pur sous la forme d'un gaz dont les molécules sont composées de deux atomes, d'où sa formule chimique H_2 . Comme tous les gaz, l'hydrogène se liquéfie lorsqu'on le refroidit suffisamment à une température de $-253^\circ C$ à la pression ambiante. Beaucoup plus léger que l'air, il se diffuse rapidement ce qui est un élément très favorable à la sécurité de son utilisation. L'élément de sécurité primordial concernant l'hydrogène est d'éviter toute sorte de confinement du gaz. Il est le seul combustible non carboné, donc non producteur de CO_2 au cours de sa combustion. Il est inodore et sa flamme est incolore.

Les produits chimiques sont habituellement stockés et transportés en grande quantité sous forme gazeuse, liquide, réfrigérée ou sous pression. Lorsqu'un jet liquide ou gazeux issu d'une fuite accidentelle provenant d'un réservoir ou d'un tube s'enflamme par l'intermédiaire d'une source d'allumage quelconque (par exemple, une surface chaude), une torchère prend naissance sous forme d'une flamme de diffusion. La principale caractéristique de la flamme de diffusion est que le combustible et l'air sont initialement séparés et que la combustion se produit dans la zone où le mélange comburant-combustible se fait. Le jet combustible se mélange ainsi à l'air par entraînement et diffusion et avec l'aide d'une source d'inflammation, se met à brûler. L'allumage se produit normalement lorsque les concentrations de combustible et d'air sont comprises dans une plage définie entre les limites d'inflammabilité (domaine d'inflammabilité) qui s'expriment en % de gaz en volume dans l'air. Ce domaine est

délimité par :

- la Limite Inférieure d’Inflammabilité (LII) : 4% pour l’hydrogène. En-dessous de cette limite, le mélange est trop pauvre en combustible (ou trop riche en oxygène) pour que la flamme puisse se propager dans le milieu gazeux,
- la Limite Supérieure d’Inflammabilité (LSI) : 75% pour l’hydrogène. Au-dessus de cette limite, le mélange est trop riche en combustible (ou trop pauvre en oxygène) pour que la flamme puisse se propager dans le milieu gazeux.

L’une des caractéristiques qui rend l’hydrogène attractif sur la plan sécuritaire est sa flottabilité. Ainsi l’hydrogène possède une masse volumique nettement inférieure à celle de l’air. Pour certains types de fuites, la dispersion verticale peut atteindre une vitesse de près de 20 mètres par seconde, soit deux fois plus vite que l’hélium et six fois plus vite que le gaz naturel, se diluant ainsi en une concentration non-inflammable dans un laps de temps restreint. La haute flottabilité de l’hydrogène dans l’air fait que les conditions pour que les concentrations critiques d’inflammabilité soient atteintes sont plus difficiles à obtenir (même chose pour la gamme de concentration pour la détonation) surtout dans un milieu non confiné. Cela signifie, en comparaison avec le gaz naturel, que la probabilité d’explosion et de détonation de l’hydrogène est plus faible en milieu ouvert. La température, la pression ambiante, l’humidité ont aussi un impact direct sur l’allumage d’un gaz. La quantité d’énergie présente dans la zone critique doit être suffisamment élevée pour démarrer le processus de combustion (flamme déjà présente dans le système, étincelle). En l’absence de source d’énergie locale, le gaz peut s’enflammer s’il atteint une température critique appelée température d’auto-allumage qui est de 585 ° C pour l’hydrogène [9]. Les jets peuvent être de deux types : subsonique ou sonique dépendant des conditions de stockage et des caractéristiques de l’embouchure de la fuite. Un écoulement subsonique possède une vitesse inférieure à la vitesse du son tandis qu’un jet sonique se déchargera à la vitesse du son. Ces derniers s’accompagnent d’une riche structure d’ondes de choc près de l’orifice.

1.2 Les torchères

Les torchères sont généralement utilisées dans les industries de procédés chimiques, telles que les installations pétrochimiques. Elles ont pour objectif d’éliminer les rejets de gaz en les brûlant à l’air libre. Utilisée pour les hydrocarbures, cette pratique comporte deux effets négatifs : le gaspillage d’une ressource naturelle précieuse ainsi que l’émission de dioxyde de carbone (CO_2), principal gaz à effet de serre. Ces installations peuvent donc représenter une source polluante importante lors d’un fonctionnement inefficace lors de vents violents. Leur utilisation pour l’hydrogène est justifiée par

l'évacuation du gaz pour des raisons sécuritaires dans les futures stations services et les installations de stockage d'hydrogène, la combustion propre de l'hydrogène n'émet pas de CO_2 dans l'atmosphère. Les torchères d'hydrogène seront au cœur de cette étude. La compréhension et la prévision des phénomènes qui s'y rattachent sont primordiales pour l'élaboration de lignes de conduite et des codes de sécurité [6].

Flux (kW/m^2)	Dommages aux équipements	Dommages aux êtres humains
37.8	Dommage à l'équipement de fabrication	1% de mortalité dans les 10s
25	Énergie minimum requise pour enflammer le bois pour une exposition indéfiniment longue	Blessures significatives dans les 10s
12.6	Fonte du plastique	Brûlure au 1er degré dans les 10s
9.5		Réactions cutanées immédiates
4.7		Seuil de douleur (ressentie en 14.5s en moyenne)
4		Douleur ressentie lors d'une exposition supérieure à 20s
1.6		Niveau sécuritaire

TABLE 1.1 – Effets de la radiation thermique sur les équipements et les êtres humains.

L'aspect qui nous intéresse est celui du transfert de chaleur provenant d'une flamme entraînant un rayonnement thermique ayant le potentiel de causer des dommages plus ou moins importants au niveau du matériel environnant ou du personnel humain proche. La radiation thermique, phénomène le plus important dans ces transferts de chaleur, est déterminée par la dimension, la forme et la quantité de chaleur générée par la flamme. Les propriétés de cette même flamme dépendent des conditions initiales de l'écoulement gazeux et de l'environnement dans lequel a lieu la combustion. En effet, les conditions atmosphériques sont un des premiers éléments à considérer qui ont un impact sur la flamme. Le vent va influencer directement la forme et l'inclinaison de la flamme, tandis que l'humidité aura davantage d'influence sur la radiation thermique émise par la flamme. La présence d'obstacles dans l'environnement ajoute une variation de la turbulence dans le domaine. La mécanique des fluides ainsi que les modèles de calcul de la radiation thermique permettent de prédire ces propriétés. En général, l'énergie de combustion de la flamme peut être transférée par radiation thermique,

convection thermique et conduction thermique. À quelques mètres de distance d'une flamme, la radiation thermique est prédominante dans le transfert de chaleur alors que la convection et la conduction thermique peuvent être prises en compte seulement dans le cas où les objets sont littéralement engloutis dans le feu. Le tableau 1.1 résume les effets de la radiation thermique sur le matériel et les êtres humains ^[4].

La présente étude a pour objectif de déterminer la radiation thermique issue des torchères dans un milieu venteux à l'aide de simulations numériques en volumes finis en utilisant un logiciel de la dynamique des fluides validé ANSYS FLUENT et de comparer les résultats au modèle analytique de Chamberlain (1987). Les scénarios utilisés pour les simulations s'appuient sur des résultats expérimentaux obtenus par Health & Safety Laboratory (HSL) à Buxton en Angleterre. Le premier chapitre est consacré à la théorie de la radiation thermique en survolant les différents modèles existant notamment celui de Chamberlain (1987) qui est au cœur même de cette étude comparative. Le second chapitre concerne le choix des différents modèles théoriques à utiliser dans le logiciel FLUENT. En effet, ce logiciel possède un grand nombre de modèles et ce chapitre exposera ceux qui ont été retenus pour l'étude. Finalement le troisième chapitre présente les résultats obtenus de la comparaison entre le modèle analytique et les simulations avec FLUENT pour trois scénarios différents. Une conclusion viendra clore cette étude et une présentation rapide concernant le paramétrage de FLUENT sera relatée dans la partie Annexe.

Chapitre 2

Radiation thermique

Les conséquences thermiques engendrées par des flammes de diffusion sur des cibles potentielles pouvant être soit humaines soit matérielles doivent être évaluées pour des raisons de sécurité. Ces effets thermiques peuvent être de deux sortes : radiatifs et convectifs. Si la cible n'est pas dans l'environnement proche de la flamme, elle ne reçoit qu'un flux radiatif alors que si elle est en contact direct avec le jet enflammé, elle recevra un flux convectif dû à l'écoulement forcé des gaz brûlés en plus d'un flux radiatif maximal ^[10]. L'objectif de cette section est de présenter deux modèles à la fois analytiques et semi-empiriques permettant d'évaluer la radiation thermique émise par un jet enflammé : la méthode de la source ponctuelle et le modèle de la flamme solide ^[6]. Ces modèles ne prédisent d'aucune façon la forme géométrique de la flamme, c'est pourquoi ils sont couplés à d'autres méthodes qui permettent d'obtenir cette information avec plus ou moins de précision. Ces méthodes seront détaillées dans ce chapitre.

2.1 Méthodes de calcul de la radiation thermique

La première méthode d'évaluation des effets thermiques radiatifs est celle du « point source ». Elle est basée sur une approche simplifiée du rayonnement et permet d'obtenir une première estimation des distances critiques liées aux effets thermiques. La méthode de la source ponctuelle est en général utilisée en association avec le modèle de l'API RP 521(American Petroleum Institute, 1973) ^[10] qui permet de façon semi-empirique de déterminer la longueur approximative de la flamme. Pour une évaluation plus précise et plus complète de la radiation thermique, une seconde méthode dite de

la « flamme solide » est utilisée et ne peut être couplée qu'à un modèle définissant de façon complète la configuration de la flamme c'est à dire sa longueur, sa largeur et son décollement par rapport à l'orifice de la fuite : le modèle de Chamberlain (1987) ^[10]. La radiation thermique pour un jet enflammé s'exprime en terme de flux radiatifs reçus. L'unité implique une puissance par unité de surface ou une énergie par unité de surface par seconde soit des W/m^2 .

2.2 Modèle de la source ponctuelle

Ce modèle consiste à assimiler la flamme à une source ponctuelle centrée sur l'axe de la flamme, centre géométrique du jet enflammé (figure 2.1). Cette source rayonne avec une puissance équivalente à celle de la totalité de la flamme. Notons qu'il existe un modèle des sources multiples qui assimile la flamme à plusieurs sources ponctuelles centrées sur l'axe de la flamme et à des distances équidistantes de cet axe. Il est alors assumé que ces sources multiples représentent une part égale de la radiation totale ^[6].

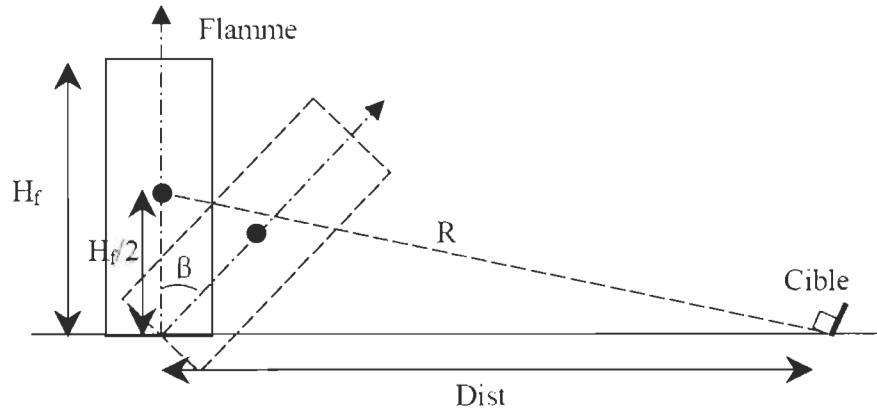


FIGURE 2.1 – Configuration du modèle de la source ponctuelle ^[10]

La radiation thermique q_a émise par une flamme assimilée à une source ponctuelle, reçue par un récepteur situé à une distance R et perpendiculaire au rayonnement de la flamme est donnée par la formule suivante ^[10] :

$$q_a = \tau_a \frac{F_s \dot{m} \Delta H_c}{4\pi R^2} \quad (2.1)$$

avec

τ_a : le facteur de transmissivité atmosphérique (-),

F_s : la fraction de chaleur radiée totale produite par la combustion (-),

\dot{m} : le débit du gaz (kg/s),

ΔH_c : la chaleur de combustion (J/kg),

R : la distance cible/source ponctuelle (m).

Cette équation applique directement la loi en carré inverse postulant que, dans ce cas, la radiation thermique est inversement proportionnelle au carré de la distance de l'origine de cette quantité physique.

En raffinerie, les torchères sont orientées verticalement. Le vent a un impact direct sur l'orientation de la flamme puisque celui-ci a tendance à l'incliner. C'est pourquoi, les équations suivantes qui représentent les distances critiques pour l'homme sont exprimées en fonction de l'angle β de la flamme par rapport à la verticale. En effet, ces équations calculent les distances D_3 et D_5 (m) pour lesquelles une cible au niveau du sol recevra respectivement les radiations thermiques de 3 kW/m^2 et 5 kW/m^2 [10] :

$$D_3 = \frac{L_f}{2} \sin \beta + \left[2,653 \cdot 10^{-5} F_s \tau_a (\dot{m} \Delta H_c) - \frac{L_f^2}{4} \cos^2 \beta \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.2)$$

$$D_5 = \frac{L_f}{2} \sin \beta + \left[1,592 \cdot 10^{-6} F_s \tau_a (\dot{m} \Delta H_c) - \frac{L_f^2}{4} \cos^2 \beta \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.3)$$

avec

L_f : la longueur de la flamme,

β : l'angle de la flamme par rapport à la verticale.

Le facteur de transmissivité atmosphérique τ_a (-), représentant l'atténuation atmosphérique du rayonnement thermique, dépend de la distance entre la surface de la flamme et la cible. Ce facteur doit être estimé à l'aide, par exemple, de la loi empirique de Bagster (1989) (valable seulement lorsque $10^4 < p_w x < 10^5 \text{ N/m}$) [10] :

$$\tau_a = 2.02 (p_w x)^{-0.09} \quad (2.4)$$

avec

p_w : la pression partielle de vapeur d'eau dans l'air pour une humidité relative donnée (N/m^2),

x : la distance entre l'enveloppe de la flamme et la cible (m).

La fraction de chaleur radiée totale produite par la combustion (-) est exprimée par Cook & al. (1987) [10] de la façon suivante :

$$F_s = f(W_g) (0.21e^{(-0.00323u_j)} + 0.11) \quad (2.5)$$

avec

u_j : la vitesse du jet à la sortie (m/s),

et où

$$f(W_g) = 1 \text{ pour } W_g < 21 \text{ g/mol},$$

$$f(W_g) = W_g / 21 \text{ pour } 21 \text{ g/mol} \leq W_g < 60 \text{ g/mol},$$

$$f(W_g) = 1.69 \text{ pour } 60 \text{ g/mol} \leq W_g.$$

La longueur de la flamme peut être déterminée avec le modèle de l'API RP 521 qui est généralement associé au modèle de la source ponctuelle. Ce modèle est basé sur une corrélation empirique basée sur différents résultats d'expériences donnant la longueur de flamme en fonction de la puissance calorifique liée au débit à l'orifice. C'est ainsi qu'à partir de la figure 2.2 (API RP 521, 1997), l'UFIP (Union Française des Industries Pétrolières) a proposé une formule empirique de la longueur de flamme [10] :

$$L_f = 2,24 \cdot 10^{-3} (\dot{Q})^{\frac{1}{2}} \quad (2.6)$$

avec $30 \text{ MW} \leq \dot{Q} \leq 10^4 \text{ MW}$ où $\dot{Q} = \dot{m} \Delta H_c$: la puissance dégagée par la combustion.

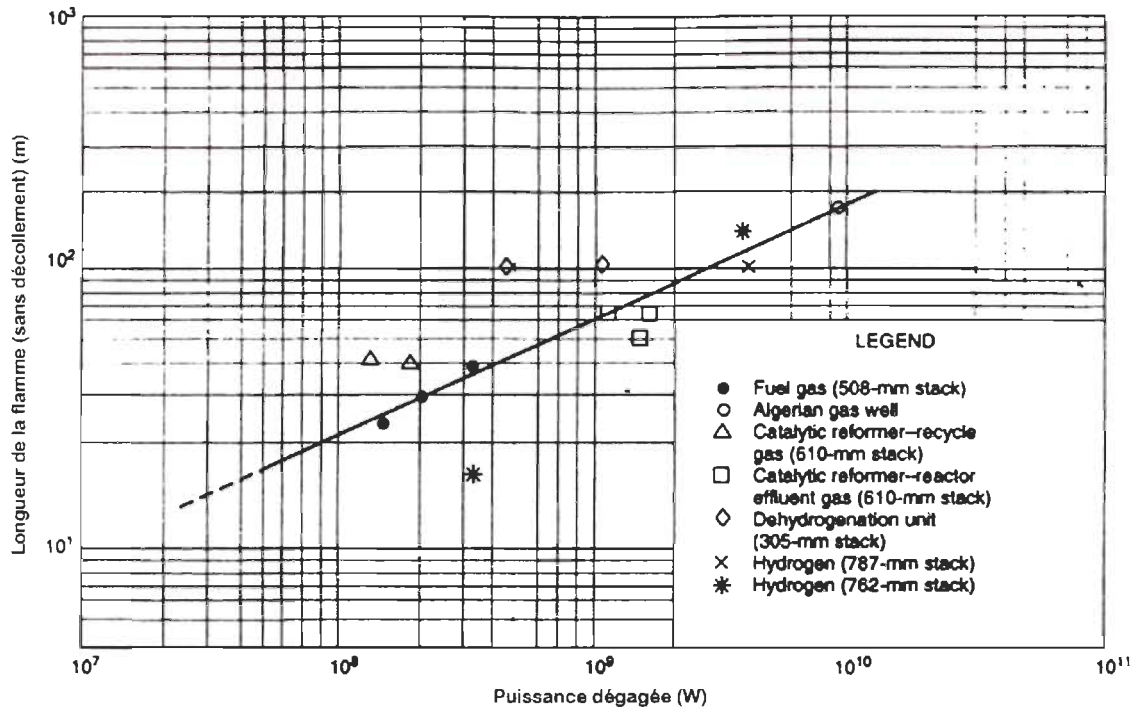


FIGURE 2.2 – Longueur de la flamme en fonction de la puissance calorifique liée au débit à l'orifice (API RP 521, 1997).

Finalement en utilisant le modèle API RP 521 (1997), les équations 2.2 et 2.3 peuvent s'écrire :

$$D_3 = \left[1,12 \cdot 10^{-3} \sin \beta + 5,15 \cdot 10^{-3} (F_s \tau_a - 0,047 \cos^2 \beta)^{\frac{1}{2}} \right] (\dot{m} \Delta H_c)^{\frac{1}{2}} \quad (2.7)$$

$$D_5 = \left[1,12 \cdot 10^{-3} \sin \beta + 3,99 \cdot 10^{-3} (F_s \tau_a - 0,079 \cos^2 \beta)^{\frac{1}{2}} \right] (\dot{m} \Delta H_c)^{\frac{1}{2}} \quad (2.8)$$

Bien que très facile à utiliser, le modèle de la source ponctuelle associé au modèle API RD 521 demeure une approche simplifiée de l'évaluation de la radiation thermique sur les hommes et les structures, d'autant plus que le modèle API RD 521 qui permet de calculer la longueur de la flamme ne prend pas du tout en compte le vent, ce qui est un facteur non négligeable dans le calcul des caractéristiques d'une flamme. Le second modèle permettant de calculer la radiation thermique émise par un jet enflammé est le modèle de la « flamme solide » qui est exclusivement associé au modèle de Chamberlain (1987), beaucoup plus complet et précis dans la description géométrique de flamme provenant d'un jet gazeux.

2.3 Modèle de la flamme solide

2.3.1 Présentation du modèle de Chamberlain (1987)

Le modèle théorique de Chamberlain (1987) a été élaboré au centre de recherche de Shell à Thornton. Ce modèle « semi-empirique » prédit la forme de la flamme ainsi que la radiation thermique émise. Le modèle a été validé par des essais effectués par la société Shell avec des gaz de pétrole liquéfiés (GPL). Deux types de tests ont été effectués pour la validation : à l'échelle du laboratoire dans des tunnels de vent et à l'échelle réelle directement sur les sites industriels (raffineries, plate-forme en haute mer...). 103 tests en tunnel ont été réalisés par Kalghatki (1983) pour déterminer la taille et la forme des flammes d'hydrocarbure soumises à un vent. Les diamètres des brûleurs variaient de 6 à 22 mm, la vitesse des gaz était comprise entre 13 et 200 m/s et la vitesse du vent variait de 2.6 à 8.1 m/s. Kalghatki a finalement représenté la flamme comme un cône tronqué (figure 2.3) dont le sommet est au niveau du trou par lequel le gaz s'échappe ^[10]. La flamme est assimilée à un volume opaque de géométrie simple dont les surfaces rayonnent uniformément. Le modèle tient compte du type de gaz, des conditions climatiques (pression, température, humidité, vitesse du vent...), des conditions de stockage, du débit du gaz, du diamètre du trou (ou du brûleur). La figure 2.4 présente les principales étapes du modèle théorique de Chamberlain (1987).

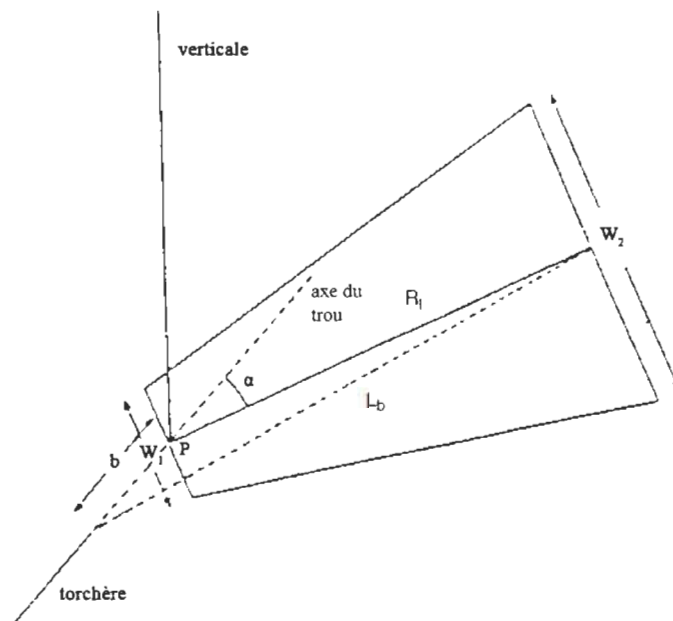


FIGURE 2.3 – Représentation de la flamme d’une torçère dans le modèle de Chamberlain (1987).

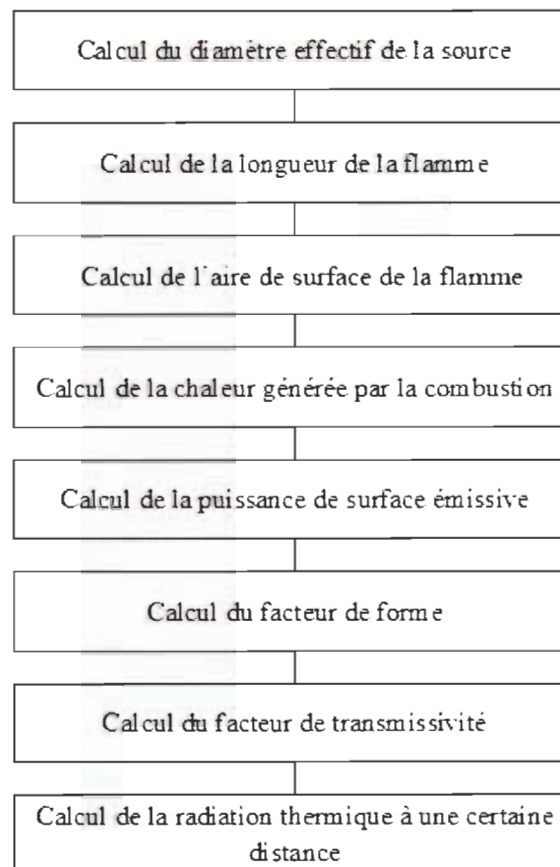


FIGURE 2.4 – Étapes principales du modèle théorique de Chamberlain (1987)

2.3.2 Calcul de la radiation thermique

Il existe trois modes de transfert de la chaleur issue d'une flamme : la conduction, la convection et le rayonnement. Afin d'évaluer le flux reçu par rayonnement thermique par une cible faisant face à une flamme, le modèle de la flamme solide considère que la cible reçoit un flux de chaleur par rayonnement depuis la surface de la flamme. Le flux thermique radiatif reçu est alors directement proportionnel au flux de chaleur rayonné par la flamme, soit l'émissivité de la flamme ou encore le pouvoir émissif surfacique SEP_{max} .

La radiation thermique $q''(x)$ (W/m^2) à une distance x de la flamme est calculée à l'aide de la relation suivante :

$$q''(x) = SEP_{max} \times F_{view} \times \tau_a \quad (2.9)$$

avec

SEP_{max} : le pouvoir émissif surfacique ou émissivité de la flamme (W/m^2),

F_{view} : le facteur de forme (-), qui correspond à un calcul géométrique de l'angle solide sous lequel la cible perçoit la flamme,

τ_a : le facteur de transmissivité atmosphérique (-), qui permet de tenir compte de l'absorption d'une partie de la chaleur rayonnée dans l'air.

Pouvoir émissif surfacique

Le pouvoir émissif surfacique SEP_{max} (W/m^2) se calcule de la façon suivante :

$$SEP_{max} = F_s \times \frac{Q'}{A} \quad (2.10)$$

avec

F_s : la fraction de chaleur radiée (-),

Q' : la chaleur nette dégagée par unité de temps (J/s),

A : l'aire du cône tronqué incluant les 2 bases (m^2).

La fraction de chaleur radiée de la surface de la flamme F_s (-) s'écrit :

$$F_s = 0.21 \times e^{-0.00323u_j} + 0.11 \quad (2.11)$$

où u_j (m/s) est la vitesse du jet à la sortie.

Finalement, la chaleur nette dégagée par unité de temps Q' (J/s) :

$$Q' = \dot{m} \times \Delta H_c \quad (2.12)$$

où ΔH_c est la chaleur de combustion du gaz (J/kg).

Facteur de forme

Le facteur de forme représente la fraction de l'énergie totale émise par la flamme qui est reçue par une cible donnée. Ce facteur dépend de la distance entre la flamme et la cible, de la forme géométrique de la flamme et de l'orientation de la flamme et de la cible ^[10]. Celui-ci est défini de la façon suivante ^[6] :

$$dF_1 = \frac{1}{\pi A_1} \int \frac{-(\vec{r} \cdot \vec{n}_1)(\vec{r} \cdot \vec{n}_2)}{(\vec{r} \cdot \vec{r})^2} dA_1 \quad (2.13)$$

avec

dF_1 : facteur de forme du cône tronqué vue par une cible,

\vec{r} : vecteur d'un élément de surface dA_1 du cône tronqué à la cible,

\vec{n}_1 : vecteur unitaire normal au cône tronqué,

\vec{n}_2 : vecteur unitaire normal au plan de la cible,

A_1 : surface totale du cône tronqué,

dA_1 : élément de surface du cône tronqué.

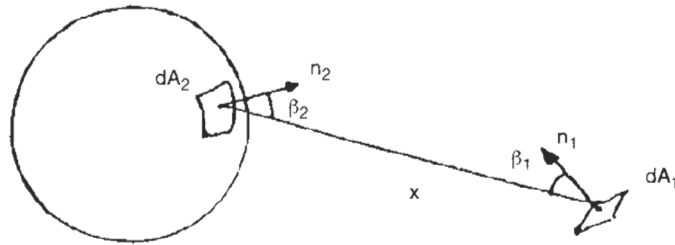


FIGURE 2.5 – Représentation des paramètres intervenant dans le calcul du facteur de forme dans le cas d'une sphère.

Facteur de transmissivité

L'équation (2.9) fait intervenir le paramètre τ_a qui est le facteur de transmissivité atmosphérique. Une fraction de la radiation émise par la surface de la flamme est absorbée par le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau présente dans l'atmosphère entre la flamme et le receveur ^[12]. Le facteur de transmissivité traduit cette atténuation de la radiation en prenant une valeur entre 0 et 1. L'unité décrit une absence totale d'atténuation. Il est donné par la relation suivante :

$$\tau_a = 1.389 - 0.135 \log_{10} (P_v d) \quad (2.14)$$

où

P_v : la pression partielle de vapeur d'eau (N/m²),

d : la distance entre un point représentant le receveur et la surface de la flamme (m).

Afin de simplifier les calculs et pour des différences de résultats négligeables, il est commun d'utiliser le centre de la flamme plutôt que la surface de celle-ci. La pression partielle de vapeur d'eau s'écrit :

$$P_v = \frac{RH}{100} \exp \left(14.4114 - \frac{5328}{T_a} \right) \quad (2.15)$$

avec

RH : l'humidité relative ambiante (%),

T_a : la température ambiante (K).

Aire du cône tronqué

Une série d'étapes est nécessaire afin de calculer la géométrie de la flamme considérée comme un cône tronqué par le modèle (figure 2.3). Ces étapes sont décrites ci-dessous :

Les premières étapes permettent de calculer la vitesse de sortie du gaz. Le pourcentage massique du gaz dans un mélange stoechiométrique dans l'air W s'écrit :

$$W = \frac{W_g}{(15.816W_g + 0.0395)} \quad (2.16)$$

où W_g est la masse moléculaire du gaz (kg/mol). La constante de Poisson γ doit être calculée par la relation suivante :

$$\gamma = \left(1 - \frac{R_c}{C_p \times W_g} \right)^{-1} \quad (2.17)$$

avec R_c la constante universelle des gaz parfaits (J/(mol.K)) et C_p la capacité thermique massique à pression constante du gaz (J/kg.K). La prochaine étape consiste à déterminer la température du jet à la sortie T_j (K) en utilisant la relation

$$T_j = T_s \times \left(\frac{P_{air}}{P_{init}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (2.18)$$

avec T_s la température initiale du gaz (K), P_{air} la pression atmosphérique (N/m²) et P_{init} la pression initiale du gaz (N/m²). La pression statique P_c (N/m²) au niveau du trou s'écrit

$$P_c = P_{init} \times \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (2.19)$$

Utilisons maintenant ce résultat pour calculer le nombre de Mach du jet M_j , nombre sans dimension. Deux cas sont à considérer, si le jet est « étranglé » (« choked »), le nombre de Mach s'écrit

$$M_j = \sqrt{\frac{(\gamma + 1) \times \left(\frac{P_c}{P_{air}} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} - 2}{\gamma - 1}} \quad (2.20)$$

Dans cette configuration précise d'un jet étranglé, le nombre de Mach est choisi égale à 1 ($M_j = 1$) alors que dans le cas où le jet est non-étranglé (« unchoked »), le nombre de Mach s'écrit

$$M_j = \sqrt{\frac{\sqrt{1 + 2(\gamma - 1)F^2} - 1}{\gamma - 1}} \quad (2.21)$$

où

$$F = 3.6233 \cdot 10^{-5} \times \frac{\dot{m}}{d_0^2} \sqrt{\frac{T_j}{\gamma W_g}} \quad (2.22)$$

et \dot{m}' le débit du gaz (kg/s), d_0 le diamètre du trou (m). Nous pouvons désormais déterminer la vitesse de sortie u_j (m/s) du jet au trou :

$$u_j = M_j \times \left(\gamma \times R_c \times \frac{T_j}{W_g} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.23)$$

La prochaine étape importante est le calcul de la dimension de la flamme. Les éléments déterminés précédemment jouent un rôle important pour la détermination de l'aspect général de la flamme et de paramètres tels que le détachement de la flamme par rapport au trou, de l'angle de la flamme avec l'axe du trou en tenant compte des conditions météorologiques. Dans un premier temps, le ratio R_w de la vitesse du vent sur la vitesse du jet se calcule de la façon suivante :

$$R_w = \frac{u_w}{u_j} \quad (2.24)$$

avec u_w la vitesse du vent (m/s) et u_j la vitesse du jet (m/s). Par la suite, nous devons déterminer la densité de l'air ρ_{air} (kg/m³) à l'aide de l'équation

$$\rho_{air} = \frac{P_{air} \times W_{air}}{R_c \times T_{air}} \quad (2.25)$$

où W_{air} est la masse moléculaire de l'air (kg/mol) et T_{air} la température de l'air (K). Déterminons le diamètre effectif de la source pour la combustion qui correspond au diamètre d'un trou imaginaire par lequel le gaz serait évacué. Pour un jet subsonique (« unchoked »), l'expression du diamètre D_s (m) est :

$$D_s = \left(\frac{4 \times \dot{m}}{\pi \times \rho_{air} \times u_j} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.26)$$

Dans le cas où le jet est sonique (ou « étranglé »), l'expression du diamètre devient

$$D_s = d_j \times \left(\frac{\rho_j}{\rho_{air}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.27)$$

où

$$\rho_j = P_c \times \frac{W_g}{(R_c \times T_j)} \quad (2.28)$$

avec ρ_j la densité du gaz dans le jet (kg/m³) et d_j le diamètre du jet au trou (m). Dans la plupart des cas, nous considérons que le diamètre du jet au trou est le même que le diamètre du trou. Introduisons maintenant une variable sans dimension Y et déterminons la à l'aide de l'équation suivante :

$$C_a \times Y^{5/3} + C_b \times Y^{2/3} - C_c = 0 \quad (2.29)$$

où les coefficients C_a , C_b et C_c s'écrivent

$$C_a = 0.024 \times \left(g \times \frac{D_s}{u_j^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.30)$$

$$C_b = 0.2 \quad (2.31)$$

$$C_c = \left(\frac{\beta}{W} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (2.32)$$

Le paramètre β ^[12] se calcule avec

$$\beta = \left(\frac{W_{air} \times T_{comb}}{W_{mp} \times T_{air}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.33)$$

avec T_{comb} la température adiabatique de combustion du gaz (K) et W_{mp} la masse moléculaire moyenne des produits de la combustion (kg/mol) . Nous pouvons maintenant déterminer la longueur de la flamme dans l'air immobile L_{b0} (m)

$$L_{b0} = Y \times D_s \quad (2.34)$$

La longueur de la flamme L_b (m), mesurée de la pointe de la flamme au trou, en tenant compte de la vitesse du vent u_w (m/s) est

$$L_b = L_{b0} \times (0.51 \times e^{-0.4u_w} + 0.49) \times (1 - 6.07 \cdot 10^{-3} \times (\theta_j - 90^\circ)) \quad (2.35)$$

avec θ_j (degré) l'angle entre l'axe du trou et l'horizontale dans la direction du vent. Nous devons maintenant calculer le nombre de Richardson de la flamme dans l'air immobile :

$$Ri(L_{b0}) = L_{b0} \times \left(\frac{g}{D_s^2 \times u_j^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.36)$$

Si $R_w \leq 0.05$, l'angle d'inclinaison α de la flamme s'écrit

$$\alpha = (\theta_j - 90^\circ) \times (1 - e^{-25.6R_w}) + \left(\frac{8000 \times R_w}{Ri(L_{b0})} \right) \quad (2.37)$$

Sinon, si $R_w > 0.05$, l'inclinaison de la flamme dépend majoritairement de la force du vent et s'écrit

$$\alpha = (\theta_j - 90^\circ) \times (1 - e^{-25.6 \times R_w}) + \left(\frac{134 + 1726 \times (R_w - 0.026)^{\frac{1}{2}}}{Ri(L_{b0})} \right) \quad (2.38)$$

L'élévation de la flamme b (m) est calculée avec la relation suivante :

$$b = L_b \times \frac{\sin(K \times \alpha)}{\sin(\alpha)} \quad (2.39)$$

avec

$$K = 0.185 \times e^{-20R_w} + 0.015 \quad (2.40)$$

Déterminons maintenant la longueur R_l (m) du cône tronqué avec l'équation

$$R_l = (L_b^2 - b^2 \times \sin^2(\alpha))^{\frac{1}{2}} - b \times \cos(\alpha) \quad (2.41)$$

Le prochain calcul est celui du rapport entre la densité de l'air et la densité du jet. Ce rapport se calcule avec

$$\frac{\rho_{air}}{\rho_j} = \frac{T_j \times W_{air} \times P_{air}}{T_{air} \times W_g \times P_c} \quad (2.42)$$

Afin de pouvoir calculer la largeur de la petite base du cône tronqué W_1 , nous devons déterminer le nombre de Richardson $Ri(D_s)$ basé sur le diamètre effectif de la source pour la combustion D_s , et le facteur C' :

$$C' = 1000 \times e^{-100R_w} + 0.8 \quad (2.43)$$

$$Ri(D_s) = D_s \times \left(\frac{g}{D_s^2 \times u_j^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.44)$$

La largeur de la petite base du cône tronqué W_1 (m) s'écrit

$$W_1 = D_s \times (13.5 \times e^{-6R_w} + 1.5) \times \left\{ 1 - \left[1 - \frac{1}{15} \times \left(\frac{\rho_{air}}{\rho_j} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \times e^{-70Ri(D_s)C'R_w} \right\} \quad (2.45)$$

Par la même occasion, nous pouvons déterminer la largeur de la grande base du cône tronqué W_2 (m) :

$$W_2 = L_b \times (0.18 \times e^{-1.5R_w} + 0.31) \times (1 - 0.47 \times e^{-25R_w}) \quad (2.46)$$

Finalement, l'aire A (m²) du cône tronqué incluant les 2 bases peut être maintenant calculée grâce à l'équation suivante :

$$A = \frac{\pi}{4} \times (W_1^2 + W_2^2) + \frac{\pi}{2} \times (W_1 + W_2) \times \left[R_l^2 + \left(\frac{W_2 - W_1}{2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.47)$$

Toutes ces étapes sont donc nécessaires afin de déterminer la géométrie de la flamme avec, selon les modèles présentés, plus ou moins de précision et ainsi déduire la radiation thermique issue d'une torchère ou plus généralement d'un jet enflammé. Le prochain chapitre a pour objectif de présenter l'outil de calcul numérique qu'est le logiciel ANSYS FLUENT en décrivant les modèles utilisés pour effectuer les simulations.

Chapitre 3

Modélisation

ANSYS FLUENT est un logiciel de CFD (« Computational Fluid Dynamics ») offrant une capacité de modélisation complète d'un large éventail de problèmes de mécanique des fluides qu'ils soient compressibles, incompressibles, laminaires ou turbulents. Il permet des analyses à l'état d'équilibre ou en régime transitoire. FLUENT inclut un grand nombre de modèles permettant la résolution de problèmes de phénomènes de transport et de transferts de chaleurs. FLUENT peut aussi modéliser les réactions chimiques à travers des géométries complexes. Les modèles de turbulence inclus dans FLUENT sont précis et robustes et font partie des éléments essentiels de la gamme des modèles offerts par le logiciel d'autant plus que ceux-ci prennent en compte d'autres phénomènes physiques tels que la flottabilité et la compressibilité.

Ce chapitre consiste à décrire les principaux modèles utilisés lors de cette étude en commençant par une comparaison des différents solveurs suivi par une description des équations fondamentales de la mécanique des fluides. Enfin, les modèles de turbulence, de combustion et de radiation utilisés seront décrits.

3.1 Type de solveurs

ANSYS FLUENT offre deux méthodes de résolution de problèmes :

- le solveur « pressure-based »
- le solveur « density-based »

Initialement, l'approche « pressure-based » a été développée pour les fluides incompressibles à faible vitesse tandis que l'approche « density-based » est orientée davantage vers les fluides compressibles à haute vitesse. Le logiciel permet tout de même l'utilisation de l'une ou l'autre des méthodes pour un grand nombre de type et de vitesse de fluide. Dans les deux cas, le champ de vitesse est obtenu à partir des équations de mouvement. Dans l'approche « density-based », l'équation de continuité est utilisée pour obtenir le champ de densité tandis que le champ de pression est déterminé à partir de l'équation d'état. D'autre part, dans l'approche « pressure-based », le champ de pression est extrait en résolvant une équation de correction de la pression qui est obtenu par la manipulation des équations de continuité et de quantité de mouvement. Quel que soit le choix de la méthode, ANSYS FLUENT va résoudre les équations qui gouvernent la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, et au besoin de l'énergie, ainsi que d'autres scalaires tels que la turbulence et les espèces chimiques.

3.1.1 Solveur « pressure-based »

Le solveur « pressure-based » utilise un algorithme qui appartient à une classe générale de méthodes appelée la méthode de projection. Dans cette méthode de projection, la contrainte sur la conservation de la masse (continuité) du champ de vitesse est obtenue en résolvant une équation pour la pression, celle-ci est dérivée des équations de continuité et de quantité de mouvement de sorte que le champ de vitesse, corrigé par la pression, satisfasse à la continuité. Les équations sont couplées entre elles et non-linéaires donc le processus de calcul de la solution utilise un système d'itération dans lequel les équations sont résolues jusqu'à ce que la solution converge. Il existe deux algorithmes de solveur « pressure-based » dans ANSYS FLUENT : un algorithme dit « segregated » et un autre dit « coupled » (figure 3.1).

Algorithme « segregated »

L'algorithme implémenté résout les équations qui gouvernent de façon séquentielle. Les équations qui gouvernent étant non-linéaires et couplées, la boucle de solution doit être effectuée de façon itérative afin d'obtenir une solution de convergence numérique. Cet algorithme découple ou sépare chaque équation (u , v , w , p , T , k , ϵ , etc.) des autres équations et les résout de façon individuelle. L'algorithme dit « segregated » est économique au niveau de l'utilisation de la mémoire puisque les équations discrétisées ne sont stockées en mémoire qu'une à la fois. En revanche, la convergence est plus

lente à cause de la résolution d'équations découplées.

Solveur “ pressure-based ”

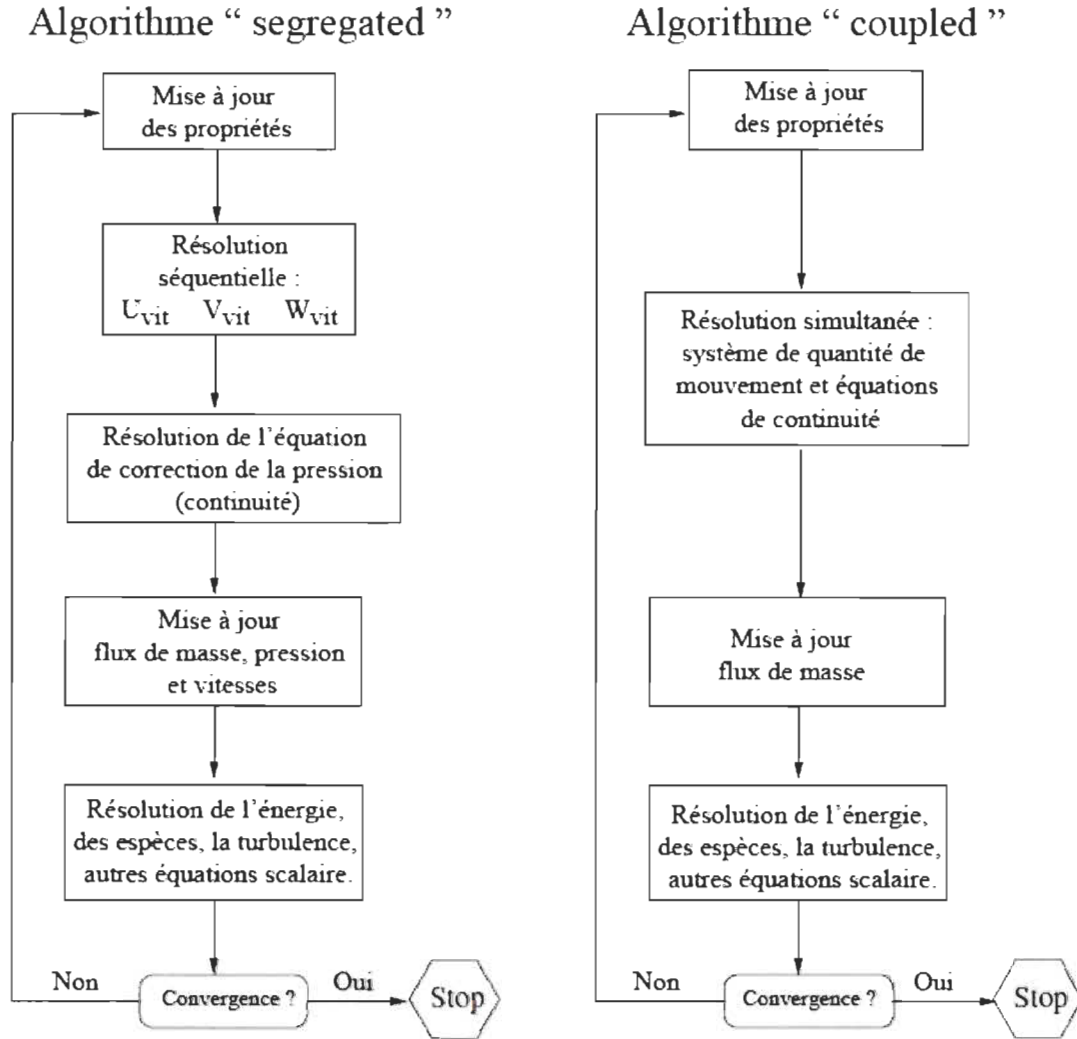


FIGURE 3.1 – Résumé du solveur « pressure-based » : algorithme « segregated » et « coupled ».

Algorithme « coupled »

Contrairement à l'algorithme « segregated » décrit précédemment, l'algorithme « coupled » résout un système couplé d'équations comprenant les équations de quantité de mouvement et de l'équation de continuité basée sur la pression. Les étapes 2 et 3 présentes dans l'algorithme « segregated » sont remplacées par une unique étape

dans laquelle le système d'équations couplées est résolu. Les équations restantes sont résolues de façon découplées comme dans l'algorithme « segregated » ce qui permet d'améliorer de manière significative le taux de convergence de la solution. En contre partie, le besoin en mémoire informatique est multiplié par 1.5 voir 2 car le système d'équations entier doit être stocké pour converger vers la solution.

3.1.2 Solveur « density-based »

Le solveur « density-based » résout les équations qui gouvernent la continuité, la quantité de mouvement, l'énergie ainsi que le transport des différentes espèces de façon simultanée (ou couplée). Les équations qui gouvernent les autres scalaires sont résolues par la suite de manière séquentielle, c'est à dire distinctes les unes des autres. Ces équations étant non-linéaires et couplées, plusieurs itérations de la boucle de solution doivent être effectuées avant qu'une solution convergée soit obtenue. Avec ce solveur « density-based », deux méthodes sont disponibles pour résoudre le système d'équations couplées : la formulation couplée explicite et la formulation couplée implicite. Les équations discrètes et non-linéaires qui gouvernent sont linéarisées afin d'obtenir un système d'équations pour les variables dépendantes dans chacune des cellules de calcul. Le système linéaire obtenu est alors résolu pour créer une mise à jour de la solution du champ de fluide. La manière dont les équations qui gouvernent sont linéarisées peut prendre une forme « implicite » ou « explicite » à l'égard de la variable dépendante (ou d'un ensemble de variables) d'intérêt.

- Méthode implicite : pour une variable donnée, la valeur inconnue dans chaque cellule est calculée en utilisant une relation incluant à la fois les valeurs existantes et inconnues des cellules voisines. Par conséquent, chaque inconnue apparaît dans plus d'une équation dans le système, et ces équations doivent être résolues simultanément afin de donner les quantités inconnues.
- Méthode explicite : pour une variable donnée, la valeur inconnue dans chaque cellule est calculée en utilisant une relation incluant uniquement les valeurs existantes. Par conséquent, chaque inconnue apparaît uniquement dans une seule équation du système et les équations pour la valeur inconnue de chaque cellule peuvent être résolues une à la fois afin de donner les quantités inconnues.

Dans la méthode de résolution « density-based », FLUENT offre le choix d'utiliser une linéarisation implicite ou explicite des équations. Ce choix s'applique uniquement à l'ensemble couplé des équations qui gouvernent. Les équations de transport pour les scalaires supplémentaires sont résolues distinctement de l'ensemble couplé (comme la turbulence, rayonnement, etc.) et sont linéarisées puis résolues de manière impli-

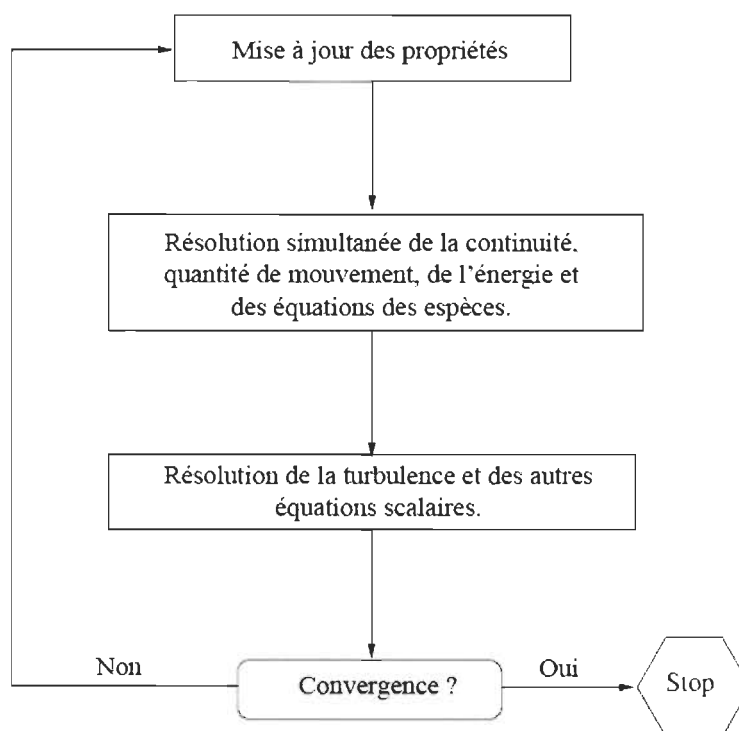


FIGURE 3.2 – Résumé du solveur « density-based ».

cite. Dans le cas où c'est la méthode implicite du solveur « density-based » qui est choisi, chaque équation de l'ensemble couplé d'équations qui gouvernent est linéarisé implicitement tout en respectant toutes les variables dépendantes de l'ensemble. Il en résulte alors un système d'équations linéaires de N équations pour chaque cellule dans le domaine, où N est le nombre d'équations couplées dans l'ensemble. Comme il y a N équations par cellule, ce système est parfois appelé un système d'équations en « bloc ». En ce qui concerne le choix du solveur « density-based » explicite, chaque équation de l'ensemble couplé d'équations qui gouvernent est linéarisé explicitement. Tout comme dans l'option implicite, il en résulte un système de N équations pour chaque cellule dans le domaine et toutes les variables dépendantes dans l'ensemble seront mises à jour une à la fois. En résumé, une approche couplée implicite résout toutes les variables (p, u, v, w, T) de toutes les cellules en même temps, alors qu'une approche explicite résout toutes variables (p, u, v, w, T) une cellule à la fois ^[1].

3.2 Équations de la mécanique des fluides

3.2.1 Équation de la conservation de la masse

L'équation de la conservation de la masse, ou équation de continuité, s'écrit de la façon suivante pour un fluide de densité ρ :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (3.1)$$

Cette équation est la forme générale pour la conservation de la masse. Elle est valide aussi bien pour les fluides incompressibles que les fluides compressibles. \vec{v} est le champ de vitesse et S_m est une masse ajoutée par l'utilisateur au besoin.

3.2.2 Équation de la conservation de la quantité de mouvement

La conservation de la quantité de mouvement d'un référentiel inertiel (sans accélération) ^[3] est décrite par

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3.2)$$

où p est la pression statique, $\bar{\bar{\tau}}$ le tenseur de stress, $\rho \vec{g}$ et \vec{F} sont respectivement le « gravitationnel body force » et « external body force ». Le tenseur de stress $\bar{\bar{\tau}}$ est donné par

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right] \quad (3.3)$$

avec μ la viscosité moléculaire, I le tenseur unitaire et le second terme de la partie droite de l'équation étant l'effet de dilatation volumique.

3.2.3 Équation de la conservation de l'énergie

La conservation de l'énergie est décrite par l'équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v} (\rho E + p)) = -\nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T + \sum_j h_j J_j + \bar{\bar{\tau}} \cdot \vec{v} \right) + S_h \quad (3.4)$$

avec k_{eff} la conductivité effective et J_j le flux d'espèces j . Les termes entre parenthèses dans la partie droite de l'équation représentent le transfert d'énergie dû à la conduction, à la diffusion des espèces et à la dissipation visqueuse. S_h représente à la fois la chaleur de la réaction chimique ainsi que d'autres sources de chaleur. Les valeurs de E et h (l'enthalpie) présentes dans l'équation 3.4 sont définies par :

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{u_i^2}{2} \quad h = \sum_j m_j h_j \quad h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j} dT \quad (3.5)$$

où m_j est la fraction massique de l'espèce.

3.3 Modèle de turbulence

Les modèles de turbulence complets les plus simples sont les modèles à deux équations dans lesquels la solution de deux équations de transport distinctes permet de déterminer de façon indépendante la vitesse de turbulence (« turbulence velocity ») et l'échelle de longueur (« length scale »). Le modèle k - ϵ standard fait partie de ces modèles par sa robustesse, l'économie et la précision raisonnable dont il fait preuve. FLUENT offre le modèle k - ϵ ainsi que deux de ses variantes : le modèle RNG k - ϵ et le modèle k - ϵ réalisable. Le modèle k - ϵ est un modèle semi-empirique basé sur les équations de transport du modèle pour l'énergie cinétique de turbulence (k) et son taux de dissipation (ϵ). Lors de la dérivation du modèle k - ϵ , l'hypothèse est que l'écoulement est complètement turbulent et que les effets de la viscosité moléculaire sont négligeable. Ce modèle est donc uniquement valable pour les écoulements turbulents [1].

Dans cette étude, c'est le modèle k - ϵ réalisable qui a été utilisé. Celui-ci se distingue du modèle k - ϵ standard sur deux points :

- le modèle k - ϵ réalisable possède une nouvelle formulation pour la viscosité turbulente,
- une nouvelle équation de transport pour le taux de dissipation ϵ a été dérivé à partir d'une équation exacte pour le transport de la fluctuation quadratique moyenne de la vorticit .

En effet, le terme « réalisable » signifie que le modèle satisfait à certaines contraintes mathématiques du stress de Reynolds. L'avantage immédiat de ce modèle est la précision dans la prédiction du taux de propagation des jets planaires et ronds. Il est également susceptible de fournir des performances supérieures pour les flux avec rotation, couches limites subissant de fort gradient de pression adverse, de séparation

et de recirculation.

3.3.1 Équations de transport du modèle k - ϵ réalisable

Les équations de transport de k et ϵ s'écrivent ^[1]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (3.6)$$

et

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \epsilon u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S \epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} C_{3\epsilon} G_b + S_\epsilon \quad (3.7)$$

où

$$C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \quad \eta = S \frac{k}{\epsilon} \quad (3.8)$$

où S est le module du tenseur moyen du taux de déformation, défini comme

$$S \equiv \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad (3.9)$$

Dans ces équations, G_k est le générateur d'énergie cinétique de turbulence dû au gradients de vitesse moyenne, G_b est le générateur d'énergie cinétique de turbulence dû à la flottabilité, Y_M représente la contribution de la dilatation fluctuante de la turbulence compressible à la vitesse de dissipation globale. C_2 et $C_{1\epsilon}$ sont des constantes. σ_k et σ_ϵ sont les nombres de turbulence de Prandtl de k et ϵ respectivement. S_k et S_ϵ sont des termes sources définis par l'utilisateur. Il est important de noter que l'équation de transport de k (équation 3.6) est la même que pour les modèles Standard k - ϵ et RNG k - ϵ à l'exception des constantes modélisées.

3.3.2 Viscosité turbulente

La viscosité turbulente ^[1] est calculée à partir de

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.10)$$

La différence entre le modèle réalisable et les modèles standard et RNG est que le terme C_μ n'est plus une constante. Il est calculé de la façon suivante :

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_S \frac{kU^*}{\epsilon}} \quad (3.11)$$

où

$$U^* = \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij}\tilde{\Omega}_{ij}} \quad (3.12)$$

et

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_{ij} &= \Omega_{ij} - 2\epsilon_{ijk}\omega_k \\ \Omega_{ij} &= \overline{\Omega_{ij}} - \epsilon_{ijk}\omega_k \end{aligned}$$

avec $\overline{\Omega_{ij}}$ le tenseur de taux de rotation observé dans un plan de référence tournant avec une vitesse angulaire ω_k . A_0 et A_S sont des constantes :

$$A_0 = 4.04, \quad A_S = \sqrt{6} \cos \phi$$

où

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{1}{3} \cos^{-1} \left(\sqrt{6W} \right), \quad W = \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\tilde{S}^3} \\ \tilde{S} &= \sqrt{S_{ij}S_{ij}}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \end{aligned}$$

3.3.3 Constantes du modèle

Les constantes ont été établies afin d'assurer que le modèle fonctionne bien pour certains écoulements canoniques. Les constantes du modèle sont ^[1] :

$$C_{1\epsilon} = 1.44, \quad C_2 = 1.9, \quad \sigma_k = 1.0, \quad \sigma_\epsilon = 1.2$$

3.3.4 Spécification des paramètres de la turbulence

Les conditions aux frontières propres à la turbulence doivent être spécifiées afin de résoudre les équations. Ces conditions sont exprimées sous la forme d'une intensité turbulente, du diamètre hydraulique ou de la taille caractéristique des tourbillons responsables de la turbulence. L'intensité turbulente est définie comme le rapport entre la racine carrée des fluctuations moyennes de la vitesse u et de la vitesse moyenne de l'écoulement \bar{u} . Une valeur de 1% ou moins est considérée comme basse et les

valeurs plus grandes que 10% sont considérées élevées. L'intensité turbulente peut être calculée, pour un problème donné, à partir d'une corrélation empirique établie pour les écoulements internes dans des conduits :

$$I \equiv \frac{u'}{\bar{u}} \cong 0.16Re^{-0.125} \quad (3.13)$$

L'échelle de la longueur de la turbulence l est une quantité physique reliée à la taille caractéristique des tourbillons des écoulements turbulents. Par exemple, pour les fluides développés (turbulents) dans des conduits, la valeur de l correspond à la taille du conduit, étant donné que la taille des tourbillons associés à la turbulence est limitée par le diamètre du conduit. Une relation approximative entre l et la taille du conduit est :

$$l = 0.07L \quad (3.14)$$

où L : le diamètre du conduit dans le cas d'un conduit circulaire.

3.3.5 Génération de la turbulence

Cette section porte sur la théorie concernant la création de la turbulence lors d'une simulation. Le terme G_k représente ici la production d'énergie cinétique de turbulence et est modélisé de la même façon pour les modèles Standard, RNG et réalisable k - ϵ .

$$G_k = -\overline{\rho u'_i u'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (3.15)$$

Pour évaluer G_k d'une manière cohérente avec l'hypothèse de Boussinesq,

$$G_k = \mu_t S^2 \quad (3.16)$$

où S est le module du tenseur moyen du taux de déformation défini à l'équation 3.9.

3.3.6 Effets de la flottabilité de la turbulence

Lorsqu'un champ de gravité non nul et un gradient de température sont présents simultanément, le modèle k - ϵ est considéré pour la génération de k due à la flottabilité (G_b dans l'équation 3.6) et la contribution correspondante à la production de ϵ dans l'équation 3.7.

La génération de turbulence due à la flottabilité est donnée par

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (3.17)$$

où Pr_t est le nombre turbulent de Prandtl pour l'énergie et g_i est le composant du vecteur gravitationnel de la i ème direction. Pour le modèle réalisable k - ϵ , la valeur par défaut de Pr_t est 0.85. Le coefficient d'expansion thermique β est définie par

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad (3.18)$$

Pour un gaz idéal, l'équation 3.17 s'écrit

$$G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho Pr_t} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (3.19)$$

D'après l'équation de transport pour k (équation 3.6), l'énergie cinétique de turbulence tend à augmenter ($G_b > 0$) dans les stratifications ou couches instables. Pour les stratifications stables, la flottabilité a tendance à supprimer la turbulence ($G_b < 0$). Dans ANSYS FLUENT, les effets de la flottabilité sur la génération de k sont toujours inclus lorsque qu'il y a à la fois un champ de gravité non nul et un gradient de température non nul. Bien que les effets de la flottabilité sur la génération de k soient relativement bien compris, les effets sur ϵ le sont beaucoup moins. Par défaut, dans ANSYS FLUENT, les effets de la flottabilité sur ϵ sont simplement négligés en choisissant G_b égal à zéro dans l'équation de transport de ϵ (équation 3.7).

3.3.7 Effets de la compressibilité sur la turbulence

Pour les flux ayant un nombre de Mach élevé, la compressibilité affecte la turbulence avec ce qui est appelé la « dissipation de dilatation » qui est normalement négligée dans la modélisation de fluides incompressibles. Négliger cette dissipation de dilatation limite la prédiction de la diminution du taux de propagation par l'augmentation du nombre de Mach pour les mélanges compressibles et les autres couches de cisaillement libres. Afin de tenir compte de ces effets dans le modèle k - ϵ , le terme de dissipation de dilatation Y_m est inclus dans l'équation de k (3.6). Ce terme est proposé par Sarkar^[11] sous la forme :

$$Y_m = 2\rho\epsilon M_t^2 \quad (3.20)$$

avec M_t le nombre de Mach

$$M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}} \quad (3.21)$$

où a est la vitesse du son ($a \equiv \sqrt{\gamma RT}$). Notons que cette modification due à la compressibilité est toujours effective lorsque la forme compressible de la loi des gaz parfaits est utilisée.

3.3.8 Chaleur de convection et transfert de masse

Dans ANSYS FLUENT, le transport de chaleur turbulent est modélisé en utilisant le concept d'analogie de Reynolds au transfert de quantité de mouvement turbulent. L'équation d'énergie modélisée s'écrit de la façon suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i} [u_i (\rho E + p)] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial x_j} + u_i (\tau_{ij})_{\text{eff}} \right) + S_h \quad (3.22)$$

où E est l'énergie totale, k_{eff} est la conductivité thermique effective et $(\tau_{ij})_{\text{eff}}$ est le tenseur de contrainte déviatorique défini par

$$(\tau_{ij})_{\text{eff}} = \mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.23)$$

Le terme de l'équation 3.22 impliquant $(\tau_{ij})_{\text{eff}}$ représente la chaleur visqueuse. Celle-ci est toujours calculée lorsque le solveur basé sur la densité est choisi. En revanche, par défaut, le solveur basé sur la pression ne le calcule pas.

Notons que pour le modèle k - ϵ réalisable, la conductivité thermique effective k_{eff} est donnée par

$$k_{\text{eff}} = k + \frac{c_p \mu_t}{Pr_t} \quad (3.24)$$

où k , dans ce cas, est la conductivité thermique.

3.4 Transport des espèces et réactions

3.4.1 Équation de transport des espèces

Dans le cas où les équations de conservation des espèces chimiques doivent être résolues, ANSYS FLUENT prédit la fraction de masse locale de chaque espèce, Y_i , grâce à la solution d'une équation de diffusion-convection pour les i espèces. La forme générale de cette équation de conservation est la suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (3.25)$$

où R_i est le taux net de la production de l'espèce i par réaction chimique et S_i est le taux de création par l'addition de la phase dispersée en plus d'une source définie par l'utilisateur.

3.4.2 Diffusion de la masse dans les fluides turbulents

Pour des fluides turbulents, ANSYS FLUENT calcule la diffusion de la masse de la façon suivante :

$$\vec{J}_i = \left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (3.26)$$

où Sc_t est le nombre turbulent de Schmidt ($\frac{\mu_t}{\rho D_t}$ où μ_t est la viscosité turbulente et D_t la diffusivité turbulente). La valeur de Sc_t par défaut est 0.7.

3.4.3 Formulation « generalized finite-rate »

Les réactions apparaissant dans l'équation 3.25 sont calculées dans ANSYS FLUENT par un de ces 3 modèles :

- le modèle « laminar finite-rate »,
- le modèle « Eddy-dissipation »,
- le modèle EDC (« Eddy-dissipation-concept »).

Dans cette étude, le modèle « laminar finite-rate » a été utilisé car il offre de bons résultats pour les flammes laminaires et est très acceptable, de façon générale, pour tout type de gaz et de combustions dont la chimie est relativement lente et ayant une faible interaction turbulence-chimie telles que les flammes supersoniques. L'utilisation de la formulation « generalized finite-rate » est appropriée pour un grand nombre d'applications comme les systèmes à réaction laminaire ou turbulente ainsi que les systèmes de combustion (pré-mélangés, non pré-mélangés et partiellement pré-mélangés) ^[1].

La combustion de l'hydrogène est régie par la réaction chimique suivante :



Son énergie d'inflammation est de 0.02 mJ soit environ 10 fois inférieure à celle des hydrocarbures classiques. La flamme de la combustion de l'hydrogène dans l'air est quasi-invisible et est d'environ 2000 °C pour les zones les plus chaudes ^[5]. Aucun composé carboné n'est créé durant le processus de combustion.

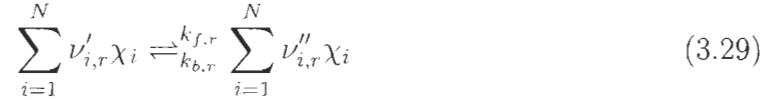
Le modèle « laminar finite-rate »

Les effets de la fluctuation de la turbulence sont ignorés et la cinétique de la réaction « reaction-rate » est déterminé par l'équation d'Arrhenius. La source nette de l'espèce chimique i dû à la réaction est calculée comme étant la somme des sources de réaction d'Arrhenius sur les N_r réactions auxquelles les espèces participent :

$$R_i = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{i,r} \quad (3.28)$$

où $M_{w,i}$ est la masse moléculaire de l'espèce i et $\hat{R}_{i,r}$ est le taux molaire de création/destruction d'Arrhenius de l'espèce i de la réaction r .

La r -ième réaction s'écrit de façon générale :



avec

N : le nombre d'espèces chimiques dans le système,

$\nu'_{i,r}$: le coefficient stoechiométrique du réactif i de la réaction r ,

$\nu''_{i,r}$: le coefficient stoechiométrique du produit i de la réaction r ,

χ_i : symbole représentant l'espèce i ,

$k_{f,r}$: la constante « forward rate » de la réaction r ,

$k_{b,r}$: la constante « backward rate » de la réaction r .

L'équation 3.29 est valide à la fois pour les réactions réversibles et irréversibles. Par défaut, les réactions dans FLUENT sont irréversibles et la composante $k_{b,r}$ est simplement ignorée. Pour les réactions irréversibles, $\hat{R}_{i,r}$, le taux molaire de création/destruction d'Arrhenius de l'espèce i de la réaction r est donné par :

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma (\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \left(k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{(\eta'_{j,r} + \eta''_{j,r})} \right) \quad (3.30)$$

avec

$C_{j,r}$: la concentration molaire de l'espèce j de la réaction r (kgmol/m³),

$\eta'_{j,r}$: « rate exponent » du réactif j de la réaction r ,

$\eta''_{j,r}$: « rate exponent » du produit j de la réaction r .

Par défaut, FLUENT ne tient pas compte du terme Γ qui représente l'effet net des éléments-tiers sur la vitesse de réaction. La constante « forward rate » de la réaction r , $k_{f,r}$, est calculée en utilisant l'expression d'Arrhenius :

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT} \quad (3.31)$$

où

$k_{f,r}$: la constante « forward rate » de la réaction r ,

A_r : le facteur pré-exponentiel,

β_r : l'exposant de la température (-),

E_r : l'énergie d'activation de la réaction (J/kgmol),

R : la constante universelle des gaz (J/kgmol.K).

3.5 Modèle de radiation

FLUENT inclut 5 modèles de radiation permettant de tenir compte des transferts de chaleur dans les simulations :

- DTRM (« Discrete Transfer Radiation Model »)
- P-1
- Rosseland
- S2S (« Surface-to-Surface »)
- DO (« Discrete Ordinates »)

C'est le modèle P-1 qui a été choisi pour cette étude et la théorie qui y est associée est présentée plus loin dans la section 3.5.2. Le modèle P-1 est le cas le plus simple du modèle général P-N qui est basé sur l'expansion de l'intensité de la radiation I , à l'intérieur d'une série orthogonale d'harmoniques sphériques [8]. Le modèle P-1 présente des avantages et des désavantages. L'équation de transfert radiatif RTE (équation 3.32) présentée dans la prochaine section est une équation de diffusion qui, avec le modèle P-1, peut être résolue facilement sans grande puissance de calcul informatique. Ce modèle inclut les effets de diffusion. Pour les applications de combustion où l'épaisseur optique (« optical thickness ») est grande, le modèle P-1 fonctionne raisonnablement bien. Le modèle P-1 peut facilement être appliqué à des géométries complexes à coordonnées curvilignes. Le modèle P-1 possède quelques limites : il assume que les surfaces sont diffuses c'est à dire que la réflexion de la radiation incidente est isotropique tout en respectant l'angle solide. L'implémentation tient compte de la radiation grise (« gray radiation ») qui implique une indépendance entre les longueurs d'ondes et les coefficients d'absorption et de diffusion. Dans le cas où l'épaisseur optique est petite, et dépendamment de la complexité de la géométrie, le modèle subit une perte de précision. Enfin, P-1 a tendance à surestimer les flux radiatifs des sources de chaleur localisée [1].

3.5.1 Équation de transfert radiatif

L'équation de transfert radiatif RTE (« Radiative Transfer Equation ») pour un milieu d'absorption, d'émission et de diffusion à la position \vec{r} et dans la direction \vec{s} s'écrit ^[1]

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (a + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \quad (3.32)$$

avec \vec{r} : le vecteur position,
 \vec{s} : le vecteur direction,
 \vec{s}' : le vecteur direction de diffusion,
 s : la longueur du trajet de propagation,
 a : le coefficient d'absorption,
 n : l'indice de réfraction,
 σ_s : le coefficient de diffusion,
 σ : la constante de Stefan-Boltzmann ($5.669 \times 10^{-8} \text{W/m}^2 \text{K}^4$),
 I : l'intensité de la radiation,
 T : température ambiante,
 Φ : la fonction de phase,
 Ω' : l'angle solide.

$(a + \sigma_s) s$ est l'épaisseur optique ou l'opacité du milieu. L'indice de réfraction n est important lorsque le rayonnement dans les milieux semi-transparents est considéré. Pour le calcul de la radiation, le coefficient d'absorption utilisé pour la combustion de l'hydrogène est 0.45 m^{-1} alors que le coefficient de diffusion est 0.01 m^{-1} [8]. La prochaine section présente la théorie du modèle de radiation P-1, modèle utilisé lors de cette étude.

3.5.2 Modèle P-1

Le flux radiatif q_r pour le modèle P-1 est obtenue à partir de l'équation suivante :

$$q_r = -\frac{1}{3(a + \sigma_s) - C\sigma_s} \nabla G \quad (3.33)$$

où a est le coefficient d'absorption, σ_s est le coefficient de diffusion, G est la radiation incidente et C est le coefficient de fonction de phase linéaire-anisotrope

(valeur de -1 à 1). Par défaut, FLUENT utilise la valeur zéro pour C ce qui représente une diffusion isotropique. L'équation 3.33 peut se simplifier de la façon suivante :

$$q_r = -\Gamma \nabla G \quad (3.34)$$

où Γ s'écrit

$$\Gamma = \frac{1}{3(a + \sigma_s) - C\sigma_s} \quad (3.35)$$

L'équation de transport pour G est

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla G) - aG + 4an^2\sigma T^4 = S_g \quad (3.36)$$

où n est l'indice de réfraction du milieu, σ est la constante de Stefan-Boltzmann et S_g est une source de radiation définie par l'utilisateur. FLUENT résout cette équation pour déterminer l'intensité locale de radiation quand le modèle P-1 est activé ^[1].

3.5.3 Conditions aux frontières pour le modèle P-1

Afin de calculer les conditions aux frontières pour l'équation de la radiation incidente, le produit scalaire du vecteur normal \vec{n} et de l'équation 3.34 est effectué :

$$q_r \cdot \vec{n} = -\Gamma \nabla G \cdot \vec{n} \quad (3.37)$$

$$q_{r,w} = -\Gamma \frac{\partial G}{\partial n} \quad (3.38)$$

Le flux de radiation incidente G sur un mur est $-q_{r,w}$. Le flux de chaleur radiative d'un mur est calculé en utilisant les conditions aux frontières suivantes :

$$I_w(\vec{r}, \vec{s}) = f_w(\vec{r}, \vec{s}) \quad (3.39)$$

$$f_w(\vec{r}, \vec{s}) = \epsilon_w \frac{n^2 \sigma T_w^4}{\pi} + \rho_w I(\vec{r}, -\vec{s}) \quad (3.40)$$

où ρ_w est la réflectivité du mur. La condition aux frontières de Marshak permet de supprimer la dépendance angulaire :

$$\int_0^{2\pi} I_w(\vec{r}, \vec{s}) \vec{n} \cdot \vec{s} d\Omega = \int_0^{2\pi} f_w(\vec{r}, \vec{s}) \vec{n} \cdot \vec{s} d\Omega \quad (3.41)$$

En remplaçant les équations 3.39 et 3.40 dans l'équation 3.41 et en intégrant, l'expression de $q_{r,w}$ devient :

$$q_{r,w} = - \frac{4\pi\epsilon_w \frac{n^2\sigma T_w^4}{\pi} - (1 - \rho_w) G_w}{2(1 + \rho_w)} \quad (3.42)$$

En assumant que les murs soient des surfaces grises diffuses (« diffuse gray surfaces »), alors $\rho_w = 1 - \epsilon_w$ et l'équation 3.42, permettant de calculer $q_{r,w}$ pour l'équation d'énergie ainsi que pour l'équation de la radiation incidente aux conditions de frontières, devient :

$$q_{r,w} = - \frac{\epsilon_w}{2(2 - \epsilon_w)} (4n^2\sigma T_w^4 - G_w) \quad (3.43)$$

Chapitre 4

Résultats

La dispersion et la combustion des gaz sous forme de jets subsoniques horizontaux ou verticaux dans l'air ambiant est un problème souvent abordé dans la littérature scientifique pour les gaz d'hydrocarbures tels que le méthane ou le propane. L'hydrogène, en revanche, n'est l'objet que de peu d'études surtout en présence d'un milieu venteux. Les modèles analytiques connus ayant pour but de prédire la forme de la flamme et la radiation générée sont tous basés sur des résultats expérimentaux obtenus à partir de ces hydrocarbures. Ce travail consiste donc à observer comment se comporte le modèle analytique de Chamberlain lorsqu'il est utilisé avec l'hydrogène et de le comparer, pour différents scénarios, au logiciel ANSYS FLUENT (version 12.1), outil de modélisation numérique puissant utilisé principalement pour résoudre des problèmes de mécanique des fluides computationnelle (CFD). FLUENT est un logiciel basé sur la méthode des volumes finis et permet de résoudre rapidement et de façon précise des problèmes d'écoulement de fluides. Ce logiciel est d'une grande complexité par la quantité de modèles théoriques qu'il contient et il en découle que le choix des modèles pour la résolution de problèmes d'écoulement de fluides est une étape primordiale pour l'obtention de résultats précis et cohérents tout en tenant compte des ressources informatiques disponibles.

Afin de s'assurer que les bons modèles ont été choisis, nous avons effectué une première simulation numérique nous permettant de valider la configuration de FLUENT pour les différents scénarios qui seront réalisés. La validation porte sur les résultats obtenus par W.G. Houf, G.H. Evans et R.W. Schefer dans la publication « Analysis of jet flames and unignited jets from unintended releases of hydrogen »^[7]. Nous comparerons alors les résultats obtenus avec FLUENT à ceux de l'article.

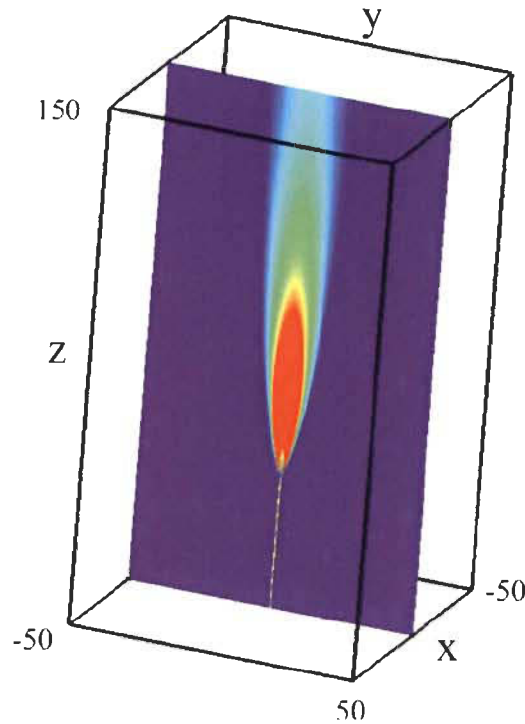


FIGURE 4.1 – Domaine de calcul et plan central montrant le profil de température pour une flamme de H_2 -air incompressible et turbulente par W.G. Houf, G.H. Evans et R.W. Schefer ; $Re_d = 10000$. ^[7].

4.1 Validation du modèle de combustion

Cette validation consiste à reproduire un scénario provenant de l'expérimentation menée par Barlow et Carter ^[2] et simulé avec FUEGO (logiciel de CFD développé par Sandia) par W.G. Houf, G.H. Evans et R.W. Schefer ^[7]. L'expérience consiste à enflammer un jet d'hydrogène en présence d'un vent de 1 m/s se propageant dans la même direction que le jet. L'hydrogène est expulsé d'un tube de 0.5 m de long et de diamètre interne 3.75 mm (diamètre externe de 4.84 mm), à un nombre de Reynolds de $Re_d = 10000$ avec un profil de vitesse turbulent complètement développé. L'hydrogène s'échappe du trou à une vitesse uniforme de 296 m/s (condition frontière). Enfin, le vent présent dans le domaine a une température de 294 K, une intensité turbulente de 0.1% et une échelle de longueur turbulente de 4.84 mm. Les figures 4.1 et 4.2 sont présentées dans l'article pris en référence pour valider nos modèles. Elles représentent respectivement le profil de température de la flamme sur un plan central et la température le long de la ligne centrale verticale dont l'origine est au centre du trou par lequel est expulsé l'hydrogène.

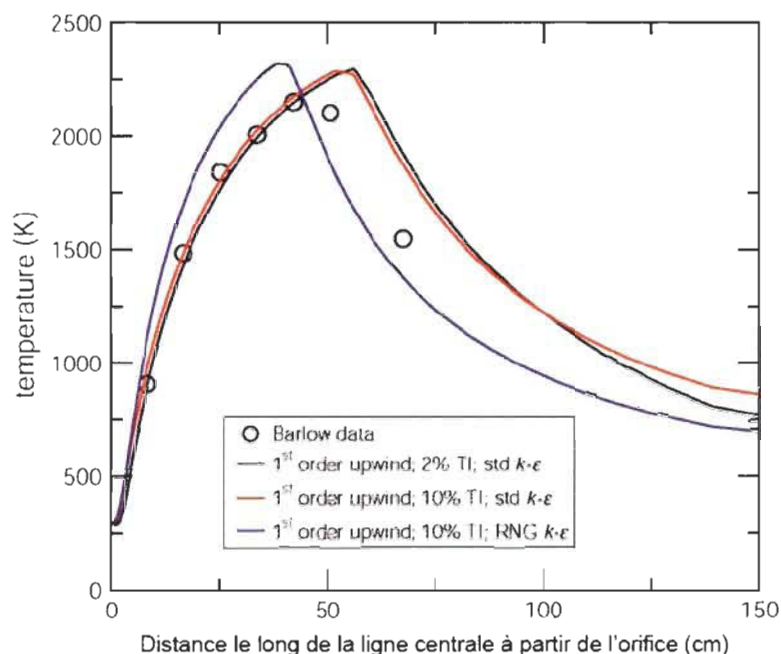


FIGURE 4.2 – Température de la flamme le long de la ligne centrale verticale pour une flamme de H_2 -air incompressible et turbulente par W.G. Houf, G.H. Evans et R.W. Schefer [7].

Les paramètres utilisés pour la validation avec FLUENT sont les suivants : la vitesse de sortie de l'hydrogène est de 296 m/s soit un débit de 0.00027397 kg/s. La température de l'air est de 294 K pour une pression atmosphérique de 101325 Pa, tout comme les conditions expérimentales de Barlow et Carter. L'intensité turbulente et l'échelle de longueur turbulente pour le jet d'hydrogène sont respectivement de 5% et 2.6 mm alors que pour le vent, ceux-ci sont respectivement de 0.1% et 4.84 mm. Le domaine de forme rectangulaire mesure 0.2 x 0.1 x 0.1 m et est divisé en 522000 cellules non-structurées. Le jet est compressible et les équations des gaz parfaits sont utilisées. Pour l'utilisation du modèle de radiation P-1 avec l'hydrogène, les coefficients d'absorption et de diffusion sont respectivement de 0.45 et 0.01 [8].

La méthodologie adoptée pour l'obtention de nos résultats avec FLUENT est la suivante : la première étape consiste à générer un vent dans le domaine jusqu'à l'obtention d'un état stable de celui-ci, c'est à dire une vitesse moyenne du vent dans le domaine qui ne varie plus. La seconde étape concerne la dispersion de l'hydrogène dans le domaine. Notons que ces deux étapes utilisent les modèles de dispersion et de turbulence. La solution est calculée jusqu'à ce que le nuage d'hydrogène qui se forme aboutisse à un état stable. Finalement, l'hydrogène est allumé pour l'obtention d'une flamme impliquant à partir de là les modèles de combustion et de radiation. La figure 4.3 donne la distribution de la température obtenue avec FLUENT le long

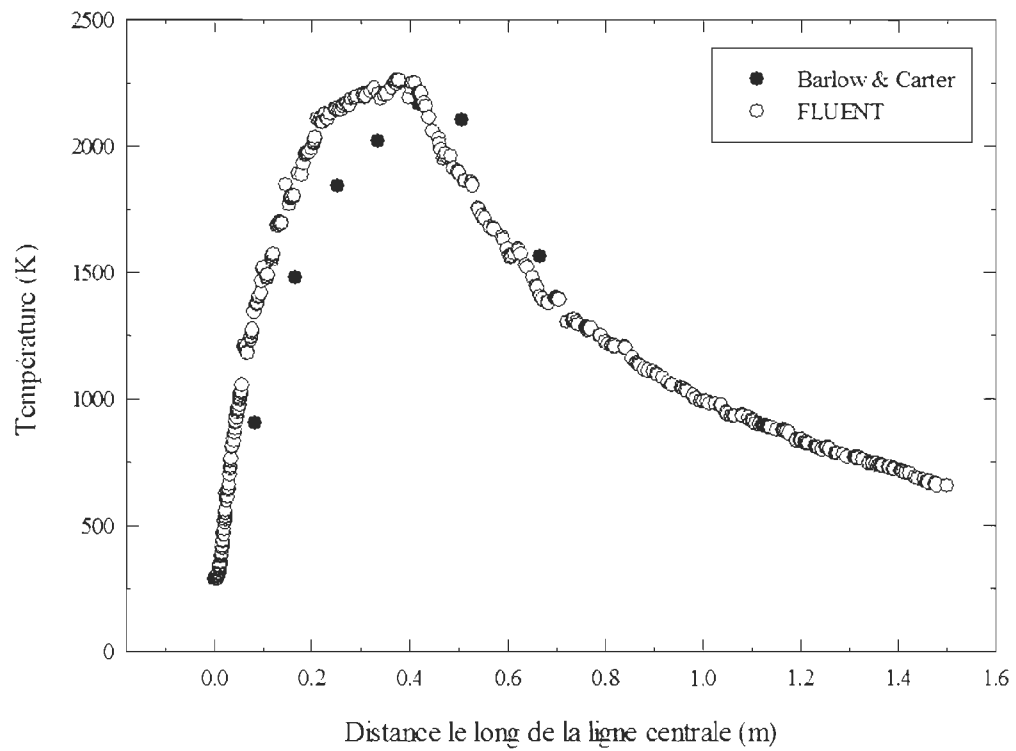


FIGURE 4.3 – Distribution de la température du jet sur la ligne centrale pour une flamme de H₂-air compressible et turbulente obtenue avec FLUENT.

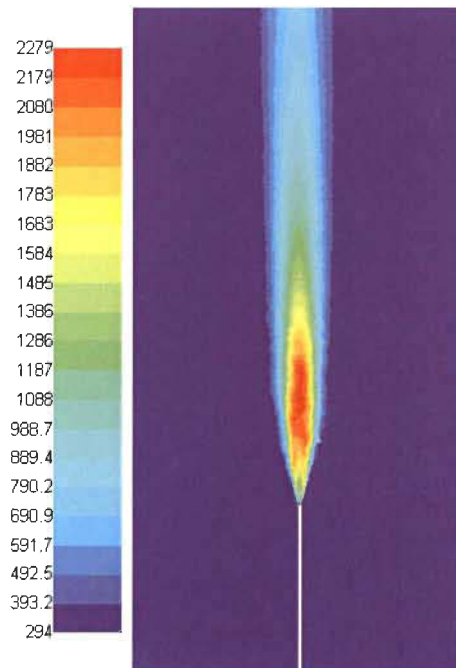


FIGURE 4.4 – Contours de températures sur le plan central obtenus avec FLUENT.

de la ligne centrale. La figure 4.4 présente les contours de températures de la flamme sur le plan central obtenu avec FLUENT. Il est aisé de constater que la méthodologie utilisée et les modèles choisis dans FLUENT permettent d'obtenir des résultats satisfaisants et cohérents avec les résultats expérimentaux de Barlow et Carter ^[2]. Cette simulation nous permet donc de valider les choix qui ont été faits sur l'utilisation de FLUENT pour l'utilisation de ce logiciel avec le gaz d'hydrogène. Nous utiliserons donc ces mêmes modèles et méthodes dans les simulations de torchères présentées dans la prochaines sections.

4.2 Torchères d'hydrogène et radiation thermique

4.2.1 Compilation du modèle de Chamberlain

Le modèle de Chamberlain a été compilé sous forme d'une application permettant de calculer la radiation thermique émise par une flamme d'hydrogène dans un milieu venteux. La théorie de ce programme est basée sur le modèle analytique de Chamberlain présenté dans la section 2.3. Les paramètres d'entrée sont identiques et chaque étape du modèle est rigoureusement suivie jusqu'au calcul du facteur de forme (équation 2.13) qui, lui, est calculé numériquement. Trois types de résultats sont donnés par l'application logicielle, tous dépendants de la nature et de la possible orientation de la cible par rapport à la radiation incidente. La figure 4.5 présente les trois types de résultat donnés par l'application logicielle basée sur le modèle du Chamberlain. Nous parlerons désormais de cette application logicielle sous le nom de « modèle de Chamberlain » dans la suite de l'étude.

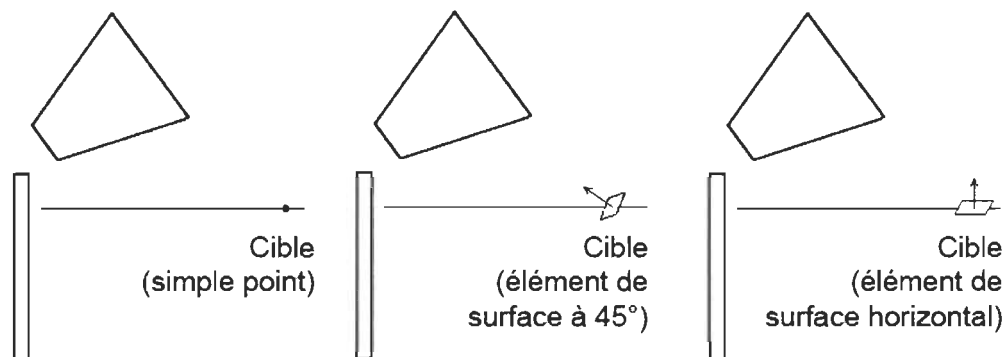


FIGURE 4.5 – Configurations représentant les 3 types de résultats donnés par l'application logicielle basée sur le modèle du Chamberlain.

Dans chacun des cas, le cône tronqué est une représentation géométrique de la

flamme et les cibles sont dans le premier cas, un simple point ou, dans les autres cas, un élément de surface orienté soit de façon oblique à un angle de 45 degrés soit horizontalement.

4.2.2 Présentation des scénarios étudiés

Les scénarios utilisés pour les simulations s'appuient sur des résultats expérimentaux obtenus par Health & Safety Laboratory (HSL) à Buxton en Angleterre. Les scénarios simulés à l'aide de FLUENT et du modèle de Chamberlain sont des cas de jets subsoniques d'hydrogène éjecté d'un tube dans l'air ambiant avec la présence d'un vent de travers dans le domaine. Le tube vertical par lequel l'hydrogène est expulsé est d'une hauteur de 5 m et de diamètre interne 2 pouces soit 0.0508 m. Trois scénarios seront considérés ayant chacun comme débit d'hydrogène 40 g/s, 80 g/s et 200 g/s. Le tableau 4.1 montre les conditions ambiantes pour chacun des scénarios étudiés.

Débit (g/s)	Humidité (%)	Température ambiante à hauteur du jet (°C)	Vitesse moyenne du vent à hauteur du jet (m/s)	Déviation du vent par rapport à l'axe central (°)
40	59	7	4	14
80	58	8	5	0
200	61	7	4	6

TABLE 4.1 – Description des scénarios étudiés.

La comparaison de la radiation thermique émise par la flamme d'hydrogène entre FLUENT et le modèle de Chamberlain se fera le long d'une ligne dans la direction des x , c'est à dire dans la même direction que le vent. Cette ligne est à une hauteur de 1.8 m du sol. La figure 4.6 donne une représentation de la ligne dans le domaine.

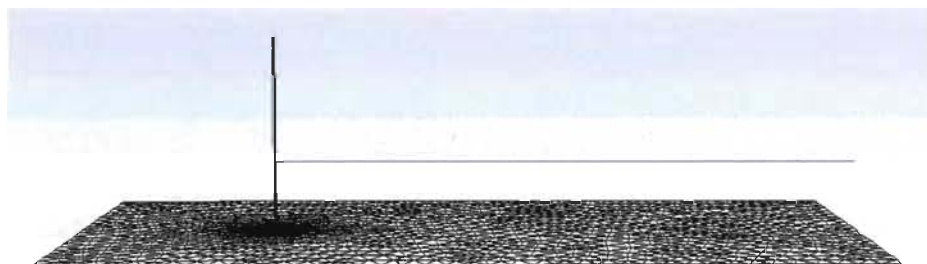


FIGURE 4.6 – Ligne virtuelle selon laquelle les résultats de la radiation thermique vont être comparés.

4.2.3 Méthodologie adoptée avec FLUENT

L'exécution de FLUENT est précédée de la modélisation en 3D du domaine de calcul avec « Design Modeler » et de la division de celui-ci en milliers d'éléments non-structurés avec « Meshing ». Ces deux modules livrés avec FLUENT sont indispensables pour la planification des simulations numériques. Le domaine de simulation a une longueur de 20 m, une largeur de 10 m et une hauteur de 15 m. Le maillage du domaine est composé de 1116401 éléments non-structurés de tailles différentes. En effet, les mailles proches du tube de 5 m de hauteur sont beaucoup plus petites que celles sur les frontières du domaine. Il s'agit donc d'un maillage progressif comme le démontre la figure 4.7.

La méthodologie est relativement simple puisque la séquence d'exécution de chacun des scénarios étudiés est identique. La figure 4.8 présente les différentes étapes qui constituent une simulation avec les différents modèles internes à FLUENT qui entrent en jeu. En premier lieu, le vent est simulé en établissant un débit d'air sur certaines frontières du domaine. Une fois l'état de stabilité du vent atteint, l'hydrogène est expulsé du tube avec le débit correspondant au scénario en cours. Ceci implique la création d'un nuage d'hydrogène dans le domaine dont le comportement est directement lié au vent précédemment établi. La dispersion est considérée complète quand la stabilité du nuage est atteinte. La dernière étape consiste à allumer le nuage d'hydrogène afin de provoquer la combustion de celui-ci et d'obtenir une radiation thermique émise par la flamme d'hydrogène. Dans ces simulations, l'hydrogène est considéré comme un gaz idéal compressible. Rappelons que le solveur « pressure-based » est utilisé et que FLUENT est paramétré dans le but d'obtenir une solution à l'équilibre et non une solution dépendante du temps.

4.2.4 Résultats

Scénario 1 : débit d'hydrogène de 40 g/s

La première simulation concerne un jet d'hydrogène dont le débit est de 40 g/s. La température de l'air ambiant est de 7 ° C et le vent de travers est caractérisé par une vitesse de 4 m/s. La première étape, comme mentionnée précédemment, consiste à générer le vent dans le domaine jusqu'à l'obtention d'un d'état stable. En considérant la géométrie du domaine de simulation, la densité de l'air à une température donnée ainsi que sa vitesse de déplacement, il est possible de calculer le débit d'air provenant

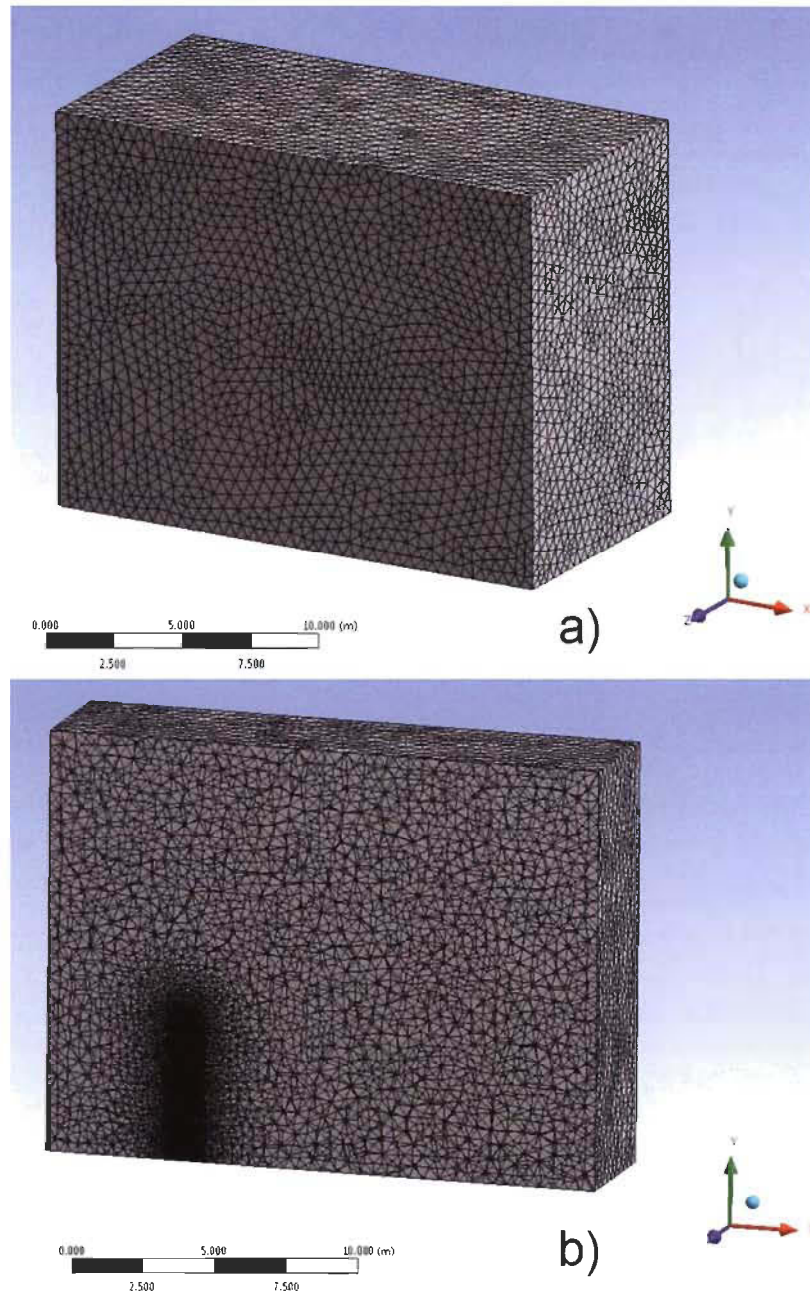


FIGURE 4.7 – Domaine de simulation : a) domaine entier avec maillage des frontières visible
b) coupe longitudinale le long de l'axe central avec maillage interne visible.

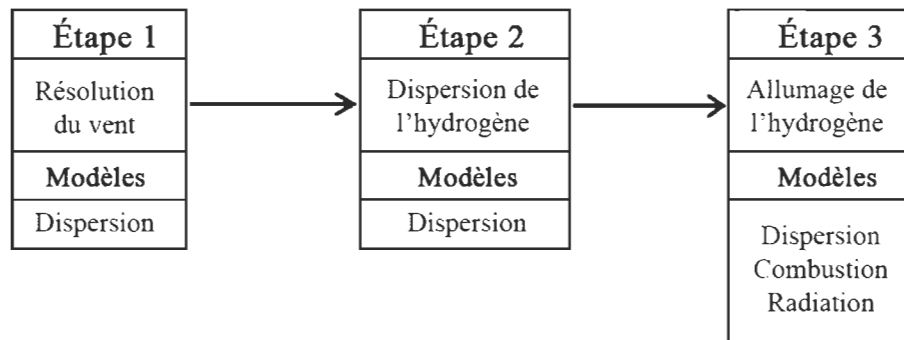


FIGURE 4.8 – Les différentes étapes d'une simulation avec FLUENT.

de la face représentant la frontière des x négatifs c'est à dire 761.4 kg/s. L'intensité turbulente et l'échelle de longueur turbulente pour le débit d'air sont respectivement de 2.5% et 0.8 m. C'est par cette face, visible dans la figure 4.9, que l'air (ou le vent) pénètre dans le domaine.

Les figures 4.10 et 4.11 montrent respectivement le profil du vent sous forme de vecteur et de contour sur le plan transversal. Nous pouvons remarquer l'uniformité du vent dans le domaine en général à l'exception de la zone entourant le tube et le sol. En effet, la vitesse du vent a tendance à naturellement ralentir à l'approche des couches limites représentant les frontières solides du domaine. Le vent à proximité du tube voit donc sa vitesse varier et subir soit une décélération soit une accélération dépendamment de la géométrie qu'il rencontre. Au final, la présence du tube dans le domaine a pour conséquence de générer de la turbulence en arrière de celui-ci. Cette turbulence aura un impact direct sur la forme et la dispersion du nuage d'hydrogène. La figure 4.12 représente l'intensité turbulente (%) sur le plan transversal.

La seconde étape concerne la dispersion de l'hydrogène dans l'air à un débit de 40 g/s. L'intensité turbulente et l'échelle de longueur turbulente pour le débit d'hydrogène sont respectivement de 3% et 1.778 mm. La vitesse maximale de l'hydrogène présente dans le domaine est de 241 m/s (4.13) et la température minimale du gaz est de 268 K. La figure 4.14 présente la distribution de la fraction molaire d'hydrogène sur le plan central. On peut immédiatement observer l'influence du vent sur la forme du nuage d'hydrogène. Comme mentionné précédemment, le contour de la fraction molaire de 4%, limite inférieure d'inflammabilité, représente la forme du nuage d'hydrogène potentiellement inflammable. La taille de ce nuage est prise en compte pour l'analyse de risque dans le domaine de la sécurité, tout comme le contour de fraction molaire de 9% qui est souvent présenté dans la littérature comme le contour représentant la flamme d'hydrogène dans le spectre du visible. Les figures 4.15 et 4.16 montrent respectivement la représentation par FLUENT du contour de la fraction

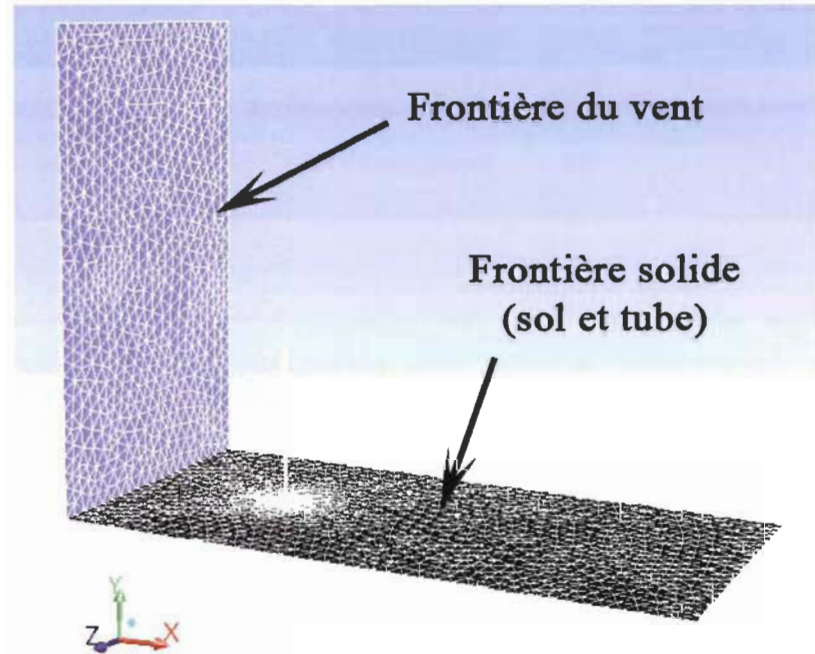


FIGURE 4.9 – Frontière du domaine par lequel le débit d'air (ou le vent) entre dans le domaine.

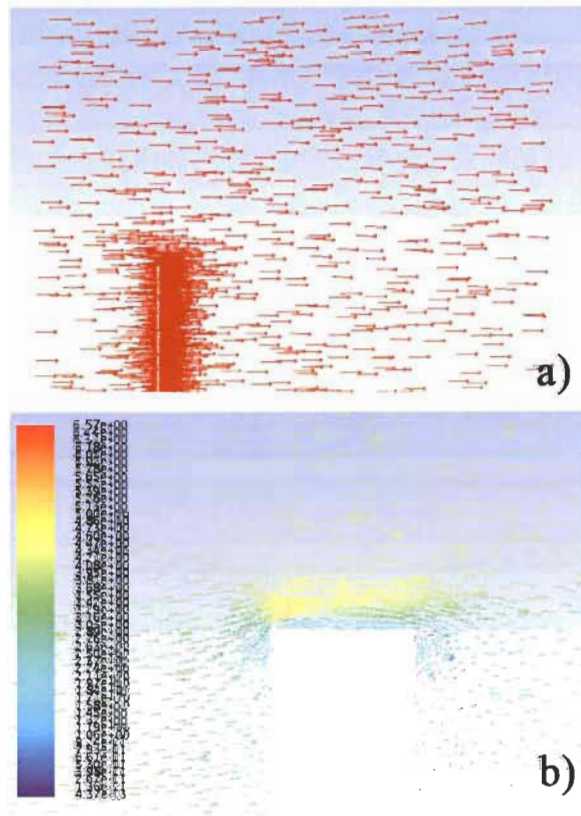


FIGURE 4.10 – Débit de 40 g/s - Profil du vent sous forme de vecteur a) dans le domaine b) autour du tube sur le plan longitudinal.

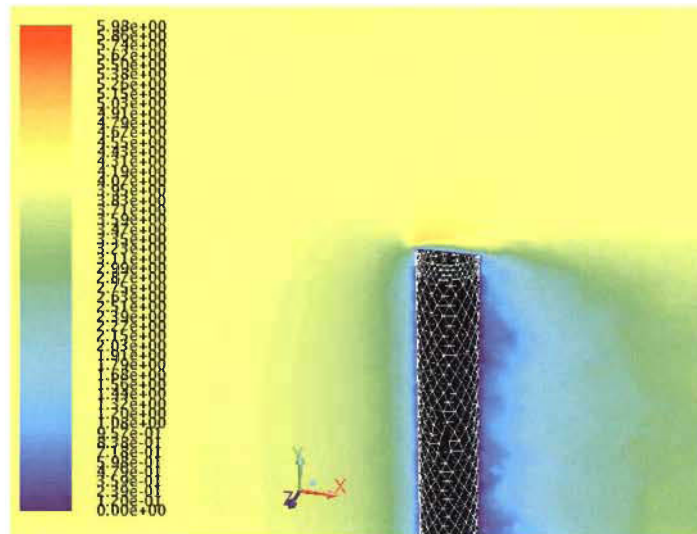


FIGURE 4.11 – Débit de 40 g/s - Distribution du vent sous forme de contour autour du tube sur le plan longitudinal.

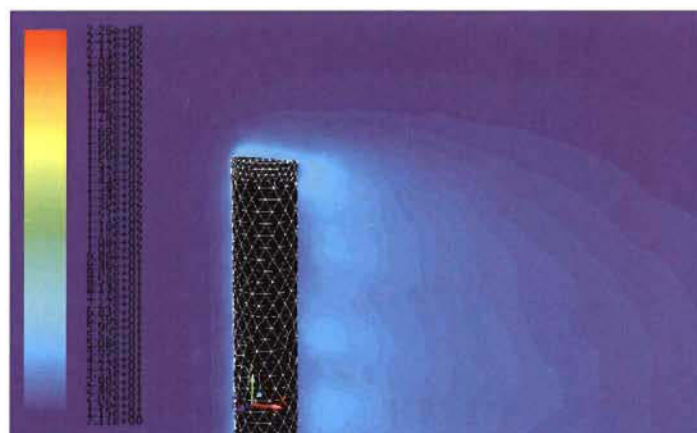


FIGURE 4.12 – Débit de 40 g/s - Intensité turbulente (%) sur le plan longitudinal.

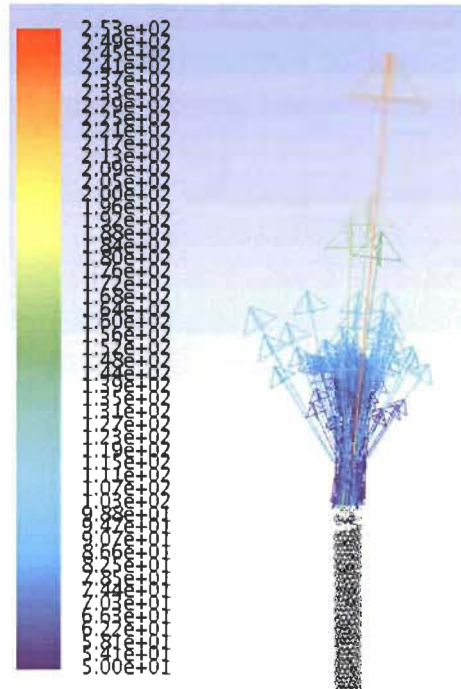


FIGURE 4.13 – Débit de 40 g/s - Vecteur vitesse à la sortie du tube lors de la dispersion de l'hydrogène dans l'air.

molaire de 4% et de 9% d'hydrogène.

La combustion de l'hydrogène présent dans le domaine sous la forme d'un nuage stable constitue la dernière étape de la simulation. Les modèles pour la combustion et de radiation sont alors activés et la solution est calculée jusqu'à la convergence et la stabilité du système. La figure 4.17 présente sur le plan central le profil de la température issue de la combustion de l'hydrogène alors que la figure 4.18 présente le contour de température de 1500K, lequel est souvent considéré comme le contour le plus représentatif de la flamme d'hydrogène dans le spectre visible. Le profil de la radiation est présenté dans la figure 4.19. L'image est une coupe centrale et montre clairement la répartition de la radiation dans le domaine. Enfin, la figure 4.20 présente sur le plan central, les contours de radiation incidents de 4 kW/m^2 et 12.6 kW/m^2 qui représentent respectivement le niveau de radiation ayant pour conséquence une sensation de douleur lors d'une exposition supérieure à 20 s pour un être humain et une brûlure au premier degré pour une exposition de 10 s (voir le tableau 1.1).

Le tableau 4.2 présente les dimensions du nuage d'hydrogène pour les contours de fraction molaire de 4% et 9% ainsi que pour le contour de température de 1500 K. On constate alors une forte similitude entre les dimensions du contour de fraction molaire de 9% et le contour de température de 1500 K qui sont tous les deux associés généralement à la forme de la flamme dans le spectre du visible. La figure 4.21 compare

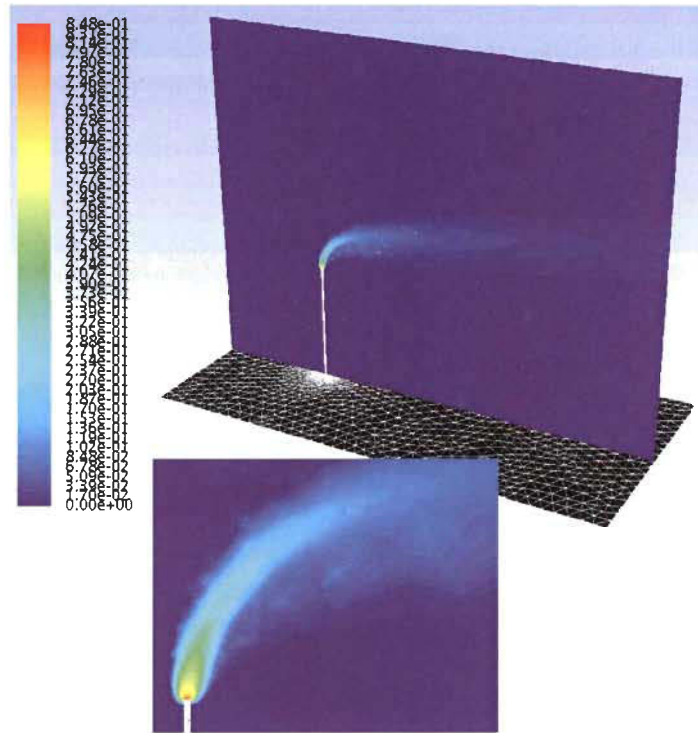


FIGURE 4.14 – Débit de 40 g/s - Distribution de la fraction molaire d'hydrogène sur le plan longitudinal du domaine.

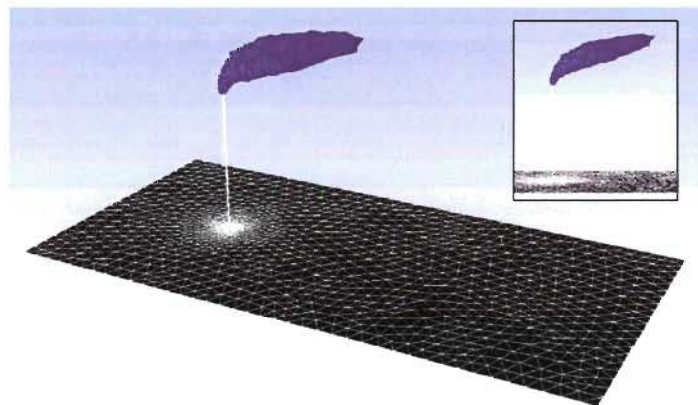


FIGURE 4.15 – Débit de 40 g/s - Représentation du contour de fraction molaire de 4% d'hydrogène.

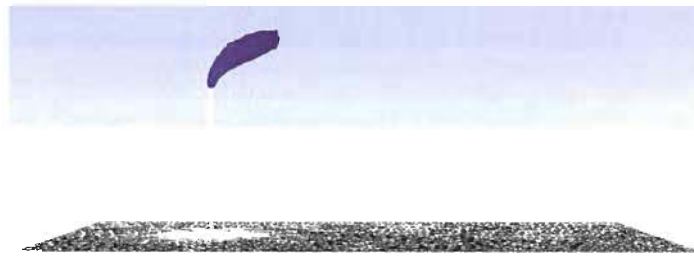


FIGURE 4.16 – Débit de 40 g/s - Représentation du contour de fraction molaire de 9% d'hydrogène.

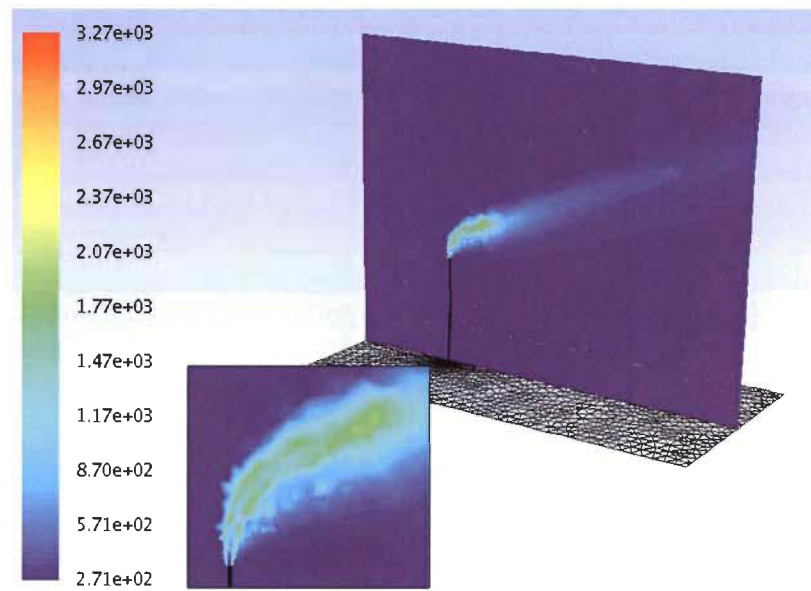


FIGURE 4.17 – Débit de 40 g/s - Profil de température sur le plan longitudinal.

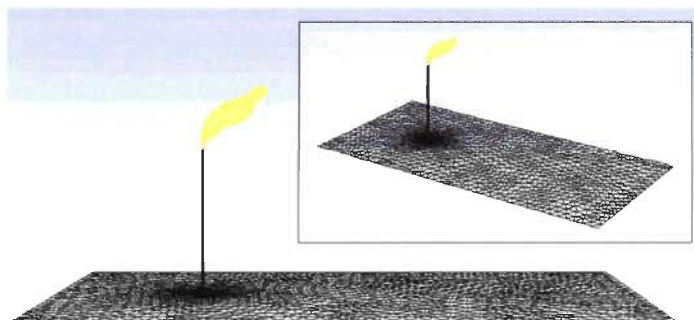


FIGURE 4.18 – Débit de 40 g/s - Contour de température de 1500 K.

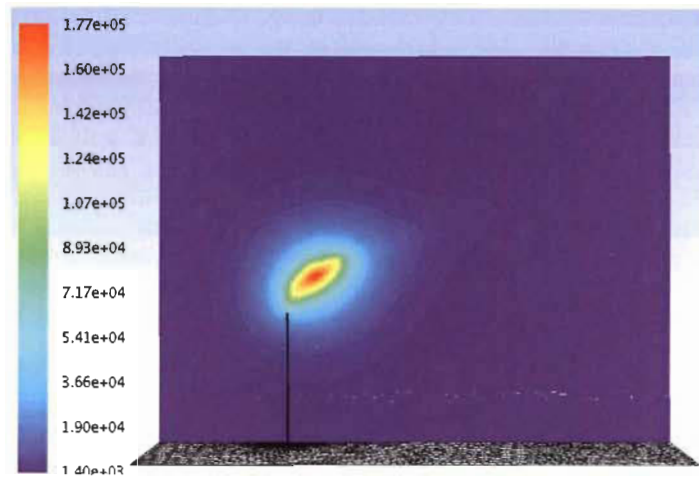


FIGURE 4.19 – Débit de 40 g/s - Profil de la radiation thermique incidente sur le plan longitudinal.

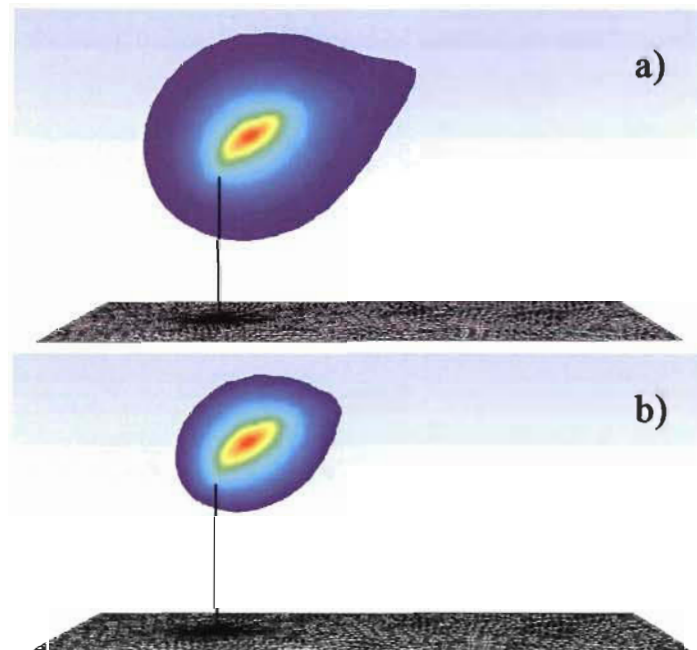


FIGURE 4.20 – Débit de 40 g/s - Contour de radiation thermique incidente de a) 4 kW/m² et b) 12.6 kW/m².

donc les résultats obtenus par FLUENT et le modèle de Chamberlain pour la radiation thermique selon la ligne présentée à la figure 4.6. Enfin, le tableau 4.3 présente pour certaines distances, les pourcentages d'écart entre les valeurs de la radiation thermique obtenues avec le modèle de Chamberlain et FLUENT.

Le pourcentage d'écart est calculé de la façon suivante :

$$\%_{\text{écart}} = \frac{Rad_{Chamb} - Rad_{Fluent}}{Rad_{Chamb}} \times 100 \quad (4.1)$$

Débit (g/s)	40	Vent (m/s)	4
Diamètre du tube (m)	0.0508	Déviaton du vent (°)	14
Température ambiante (° C)	7	Type de jet	subsonique
Nuage d'hydrogène (dispersion)			
Fraction molaire (%)	4	L (horizontal) (m)	5.5
		H (vertical) (m)	2.6
	9	L (horizontal) (m)	2.3
		H (vertical) (m)	1.9
Flamme d'hydrogène (combustion)			
Température (K)	1500	L (horizontal) (m)	2.4
		H (vertical) (m)	2.2

TABLE 4.2 – Résultats pour 40 g/s et 2".

Distance du tube (m)	Radiation thermique (kW/m^2)				% d'écart		
	Chamberlain (SP)	Chamberlain (ESO)	Chamberlain (ESH)	FLUENT	FLUENT vs Chamberlain (SP)	FLUENT vs Chamberlain (ESO)	FLUENT vs Chamberlain (ESH)
2	4.022	2.251	2.607	2.320	42.3	-3.1	11.0
3	3.154	2.519	2.557	2.107	33.2	16.4	17.6
4	2.460	2.507	2.272	1.857	24.5	25.9	18.3
5	1.933	2.313	1.894	1.678	13.2	27.5	11.4
7	1.225	1.749	1.201	1.498	-22.3	14.3	-24.8
9	0.806	1.249	0.737	1.442	-78.9	-15.4	-95.7

TABLE 4.3 – Pourcentages d'écart pour la radiation thermique à plusieurs distances du tube entre le modèle de Chamberlain et FLUENT pour un débit de 40 g/s (SP : simple point, ESO : élément de surface oblique, ESH : élément de surface horizontal).

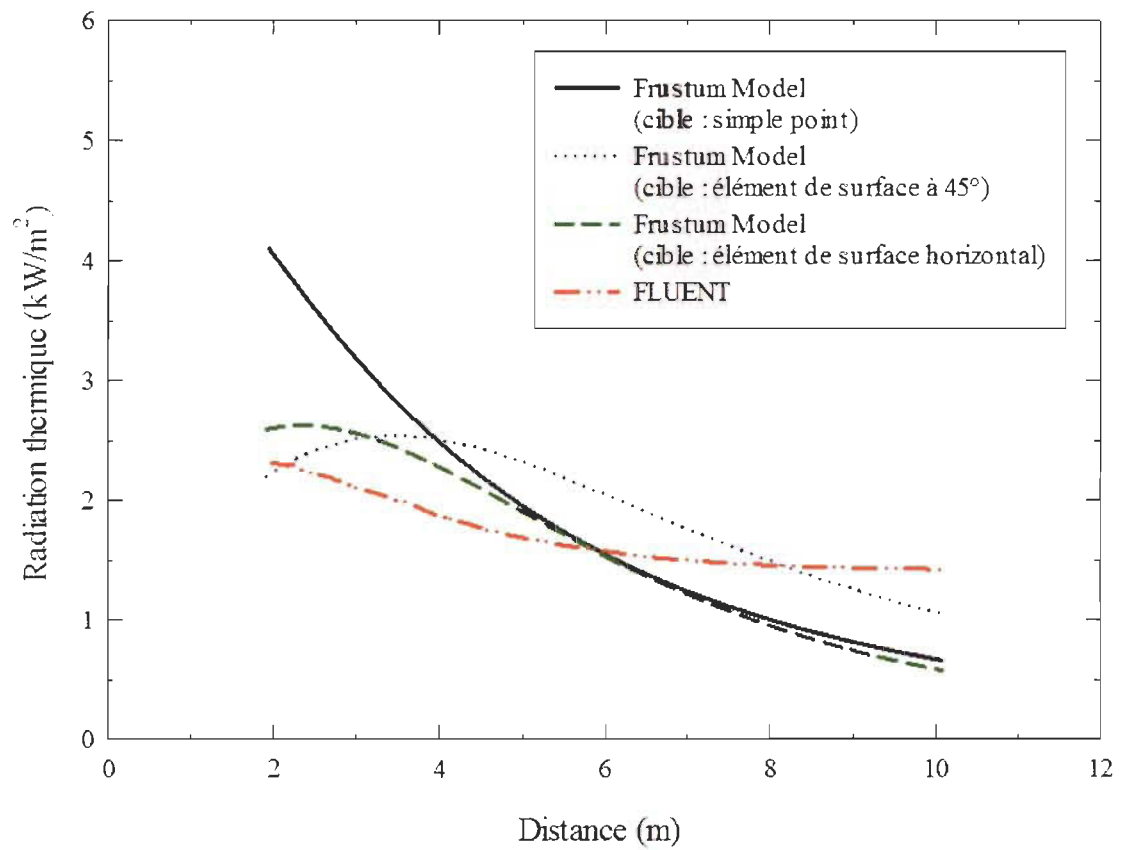


FIGURE 4.21 – Débit de 40 g/s - Résultats de la radiation thermique pour un débit d'hydrogène de 40 g/s.

Scénario 2 : débit d'hydrogène de 80 g/s

Le second scénario simulé avec FLUENT et le modèle de Chamberlain est un jet d'hydrogène dont le débit est deux fois plus élevé que le premier scénario, c'est à dire 80 g/s. La température de l'air ambiant est de 8 ° C et le vent de travers est caractérisé par une vitesse de 5 m/s obtenue avec un débit d'air de 938.5 kg/s. L'intensité turbulente et l'échelle de longueur turbulente pour le débit d'air sont respectivement de 2.5% et 0.8 m. La méthodologie reste identique pour toutes les simulations, ce qui permet d'obtenir dans un premier temps la distribution du vent sous forme de vecteur et le profil du vent sous forme de contour sur le plan transversal (respectivement les figures 4.22 et 4.23). Le vent est relativement uniforme dans le domaine à l'exception des surfaces ou celui-ci subit des variations de vitesses créant des effets de turbulence, notamment en arrière du tube. Cette turbulence est visible à la figure 4.24.

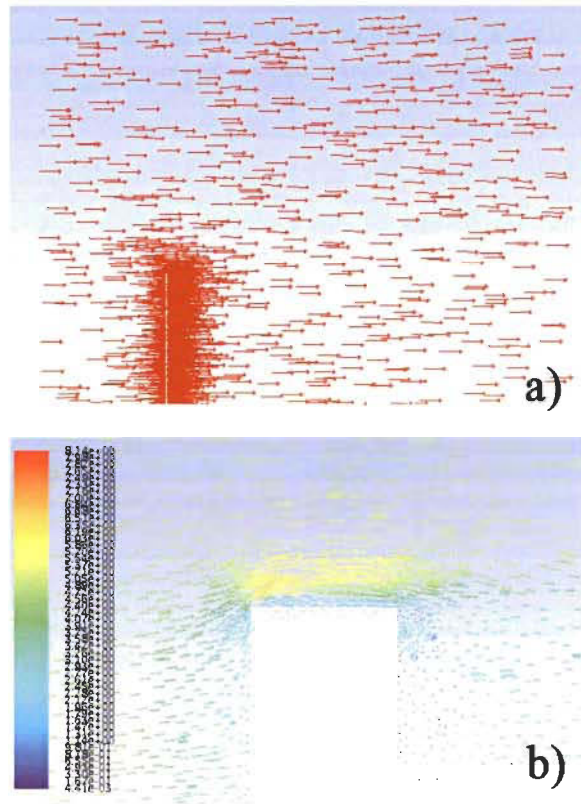


FIGURE 4.22 – Débit de 80 g/s - Profil du vent sous forme de vecteur a) dans le domaine b) autour du tube sur le plan longitudinal.

La dispersion de l'hydrogène dans l'air à un débit de 80 g/s permet la formation de vitesses importantes au niveau de la sortie du tube et génère un nuage d'hydrogène dans le domaine. La vitesse maximale de l'hydrogène présente dans le domaine est de 495 m/s (4.25) et la température minimale du gaz est de 265 K. La figure 4.26 présente

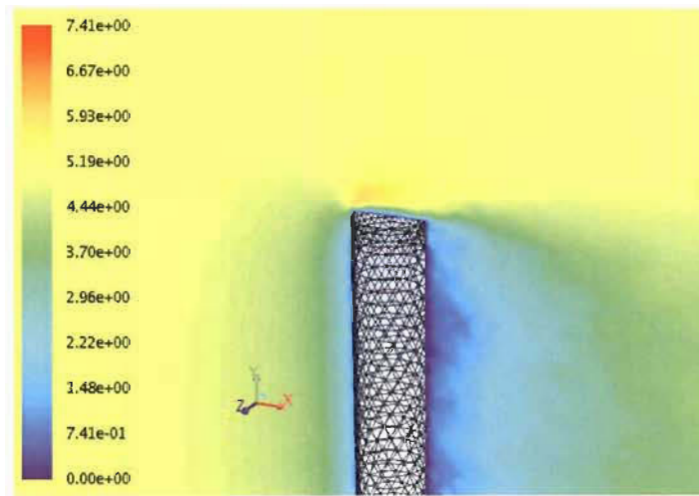


FIGURE 4.23 – Débit de 80 g/s - Distribution du vent sous forme de contour autour du tube sur le plan longitudinal.

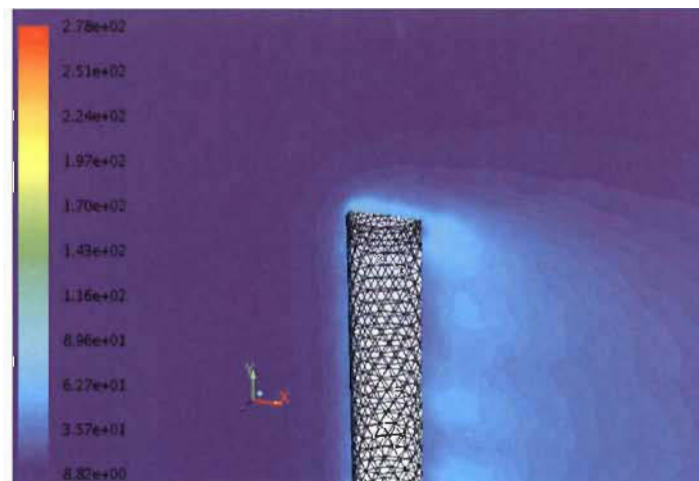


FIGURE 4.24 – Débit de 80 g/s - Intensité turbulente (%) sur le plan longitudinal.

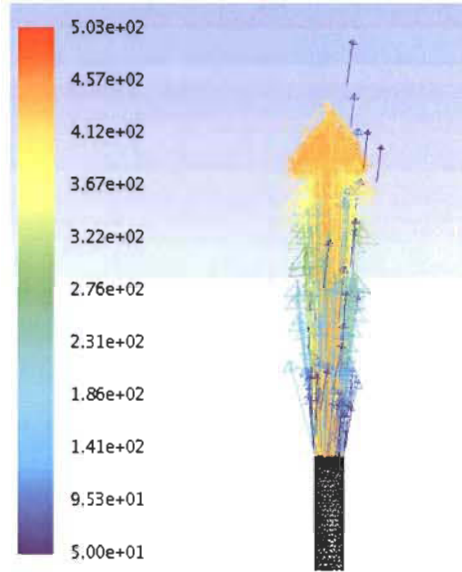


FIGURE 4.25 – Débit de 80 g/s - Vecteur vitesse à la sortie du tube lors de la dispersion de l'hydrogène dans l'air.

la distribution de la fraction molaire d'hydrogène sur le plan central. Les figures 4.27 et 4.28 montrent respectivement la représentation par FLUENT du contour de la fraction molaire de 4% et de 9%.

La figure 4.29 présente sur le plan central le profil de la température issue de la combustion de l'hydrogène alors que la figure 4.30 présente le contour de température de 1500 K. Le profil de la radiation est présenté à la figure 4.31. Enfin, la figure 4.32 présente sur le plan central, les contours de la radiation incidente de 4 kW/m^2 et 12.6 kW/m^2 .

Le tableau 4.4 présente les dimensions du nuage d'hydrogène pour les contours de fraction molaire de 4% et 9% ainsi que pour le contour de température de 1500 K. La figure 4.33 compare donc les résultats obtenus par FLUENT et le modèle de Chamberlain pour la radiation thermique selon la ligne présentée à la figure 4.6. Enfin, le tableau 4.5 présente pour certaines distances, le pourcentage d'écart (équation 4.1) des valeurs de la radiation thermique obtenues avec FLUENT et le modèle de Chamberlain.

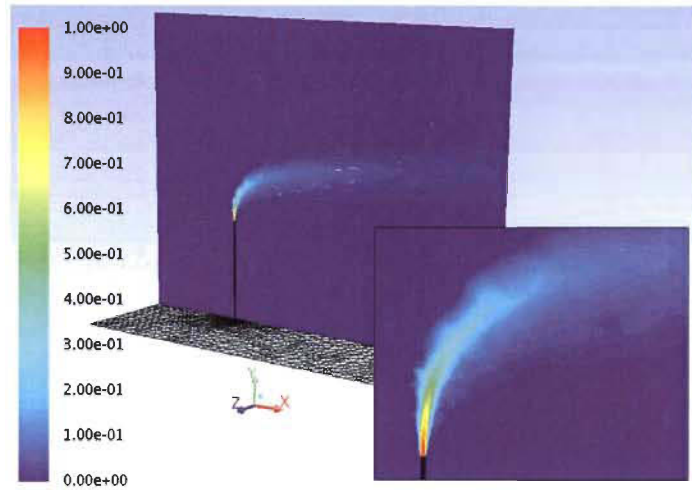


FIGURE 4.26 – Débit de 80 g/s - Distribution de la fraction molaire d'hydrogène sur le plan longitudinal du domaine.

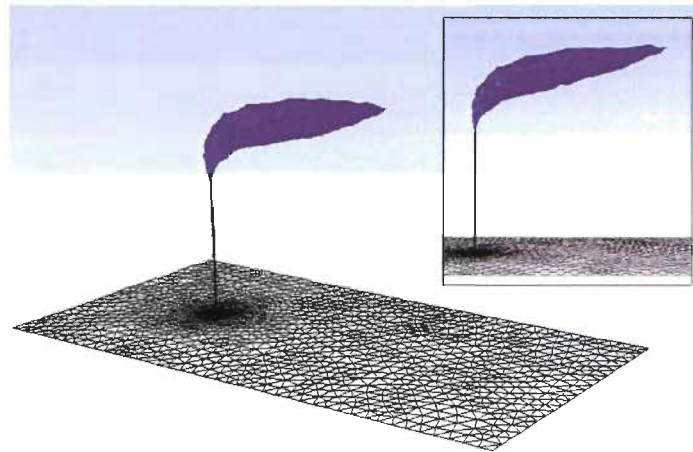


FIGURE 4.27 – Débit de 80 g/s - Représentation du contour de fraction molaire de 4% d'hydrogène.

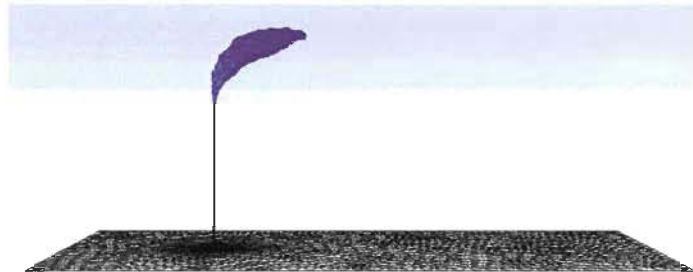


FIGURE 4.28 – Débit de 80 g/s - Représentation du contour de fraction molaire de 9% d'hydrogène.

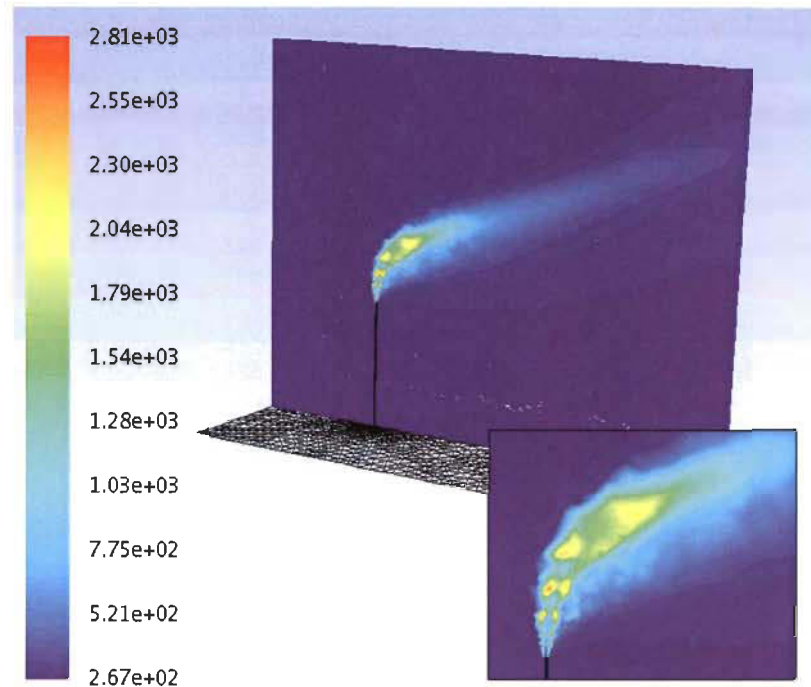


FIGURE 4.29 – Débit de 80 g/s - Profil de température sur le plan longitudinal.

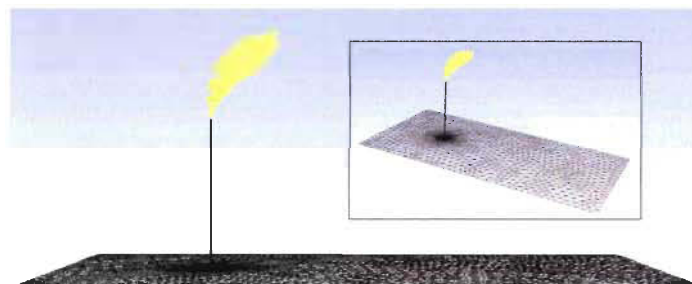


FIGURE 4.30 – Débit de 80 g/s - Contour de température de 1500 K.

Débit (g/s)	80	Vent (m/s)	5
Diamètre du tube (m)	0.0508	Déviaton du vent (°)	0
Température ambiante (° C)	8	Type de jet	subsonique
Nuage d'hydrogène (dispersion)			
Fraction molaire (%)	4	L (horizontal) (m)	7.8
		H (vertical) (m)	3.4
	9	L (horizontal) (m)	3.0
		H (vertical) (m)	2.6
Flamme d'hydrogène (combustion)			
Température (K)	1500	L (horizontal) (m)	2.3
		H (vertical) (m)	2.9

TABLE 4.4 – Résultats pour 80 g/s et 2".

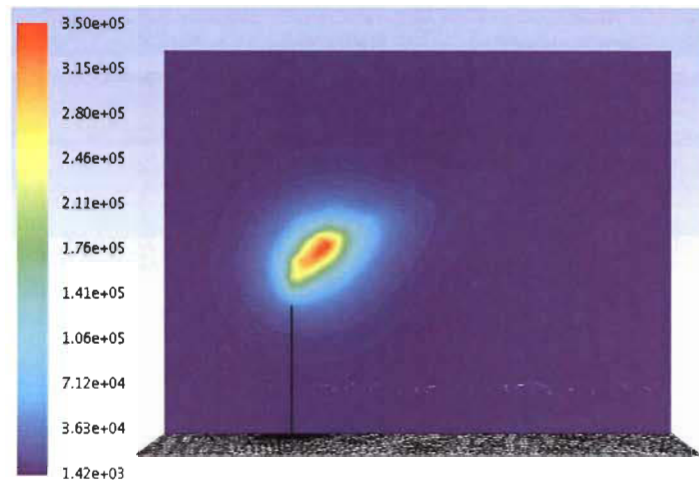


FIGURE 4.31 – Débit de 80 g/s - Profil de la radiation thermique incidente sur le plan longitudinal.

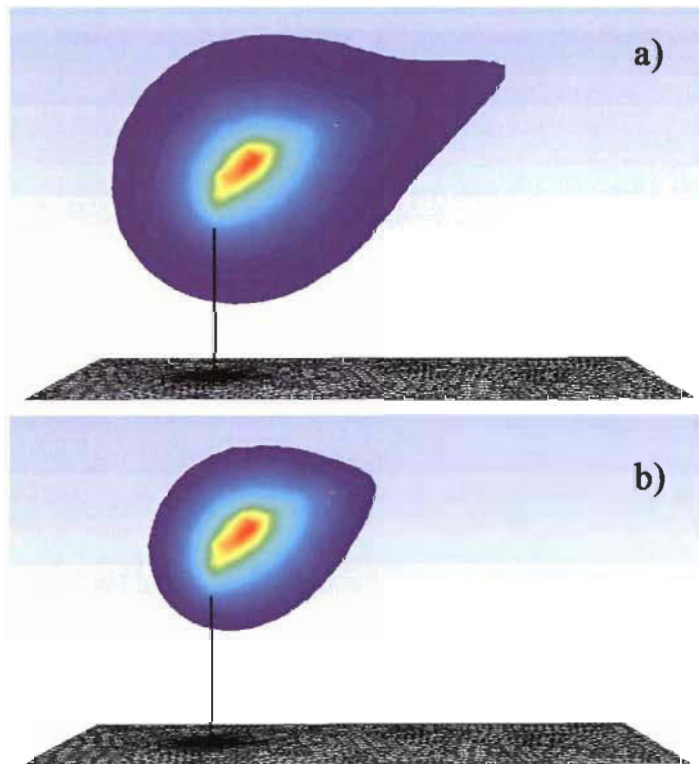


FIGURE 4.32 – Débit de 80 g/s - Contour de radiation thermique incidente de a) 4 kW/m^2 et b) 12.6 kW/m^2 .

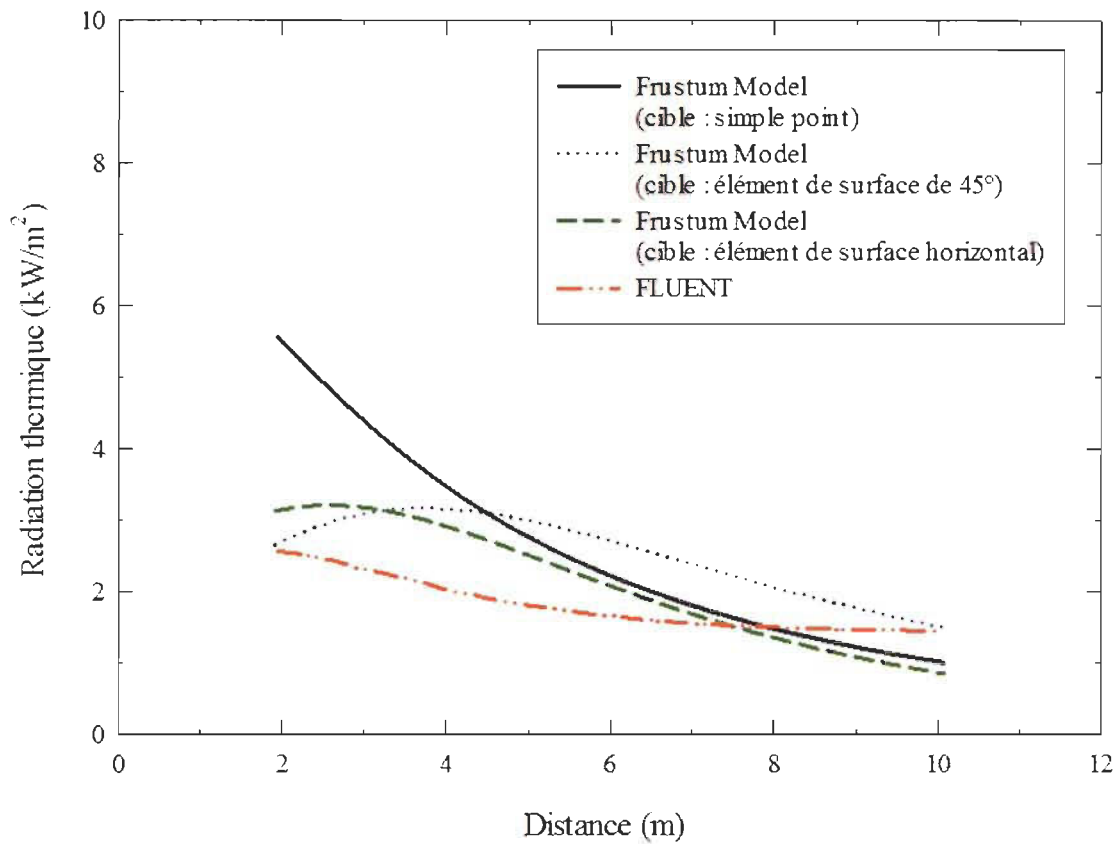


FIGURE 4.33 – Débit de 80 g/s - Résultats de la radiation thermique pour un débit d'hydrogène de 80 g/s.

Distance du tube (m)	Radiation thermique (kW/m^2)				% d'écart		
	Chamberlain (SP)	Chamberlain (ESO)	Chamberlain (ESH)	FLUENT	FLUENT vs Chamberlain (SP)	FLUENT vs Chamberlain (ESO)	FLUENT vs Chamberlain (ESH)
2	5.467	2.718	3.160	2.567	53.0	5.5	18.7
3	4.354	3.104	3.184	2.305	47.0	25.7	27.6
4	3.443	3.165	2.914	2.039	40.8	35.6	30.0
5	2.742	2.997	2.506	1.793	34.6	40.2	28.4
7	1.790	2.377	1.680	1.569	12.4	34.0	6.6
9	1.211	1.762	1.078	1.479	-22.1	16.1	-37.2

TABLE 4.5 – Pourcentages d'écart pour la radiation thermique à plusieurs distances du tube entre le modèle de Chamberlain et FLUENT pour un débit de 80 g/s (SP : simple point, ESO : élément de surface oblique, ESH : élément de surface horizontal).

Scénario 3 : débit d'hydrogène de 200 g/s

Le dernier scénario est un jet d'hydrogène dont le débit est de 200 g/s. La température de l'air ambiant est de 7 °C et le vent de travers est caractérisé par une vitesse de 4 m/s. Le débit d'air est de 761.4 m/s, l'intensité turbulente et l'échelle de longueur turbulente pour le débit d'air sont respectivement de 2.5% et 0.84 m. La distribution du vent sous forme de vecteur et le profil du vent sous forme de contour sur le plan transversal sont présentés respectivement par les figures 4.34 et 4.35. La turbulence générée est visible à la figure 4.36.

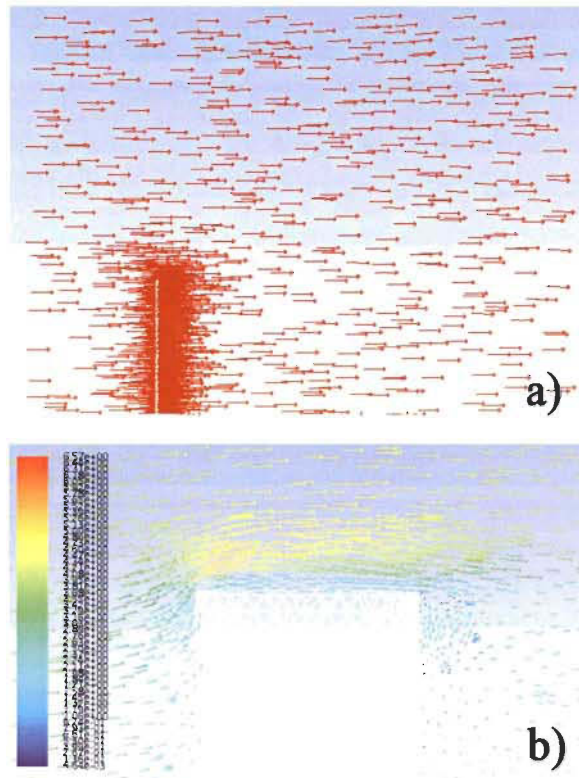


FIGURE 4.34 – Débit de 200 g/s - Profil du vent sous forme de vecteur a) dans le domaine b) autour du tube sur le plan longitudinal

La vitesse maximale de l'hydrogène présente dans le domaine est de 924 m/s (4.37) et la température minimale du gaz est de 215 K. La figure 4.38 présente la distribution de la fraction molaire d'hydrogène sur le plan central. Les figures 4.39 et 4.40 montrent respectivement la représentation par FLUENT du contour de la fraction molaire de 4% et de 9% d'hydrogène.

La figure 4.41 présente sur le plan central le profil de la température issue de la combustion de l'hydrogène alors que la figure 4.42 présente le contour de température de 1500K. Le profil de la radiation est présenté dans la figure 4.43. Enfin, la figure

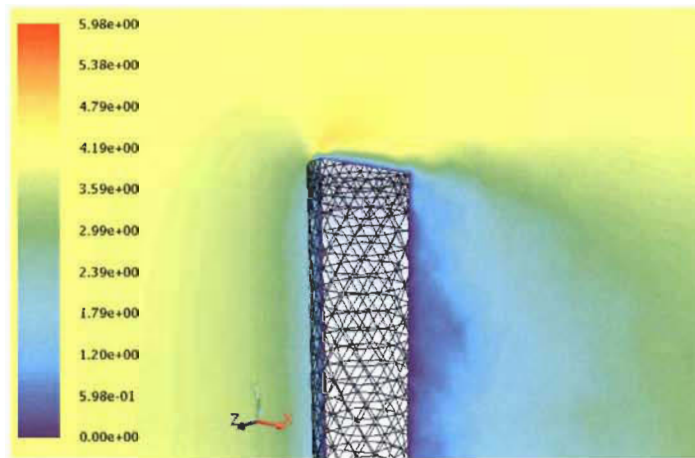


FIGURE 4.35 – Débit de 200 g/s - Distribution du vent sous forme de contour autour du tube sur le plan longitudinal.

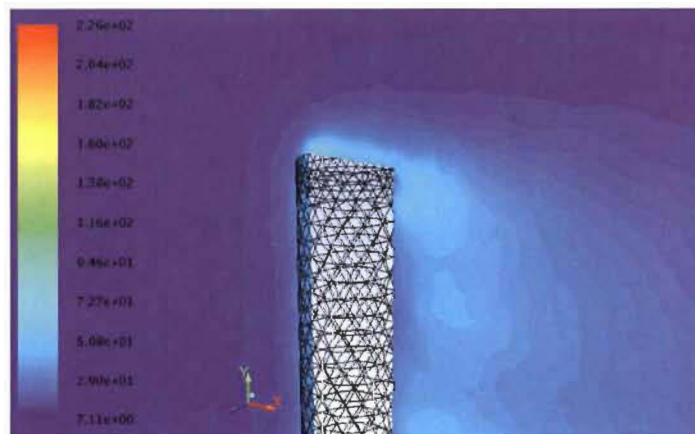


FIGURE 4.36 – Débit de 200 g/s - Intensité turbulente (%) sur le plan longitudinal.

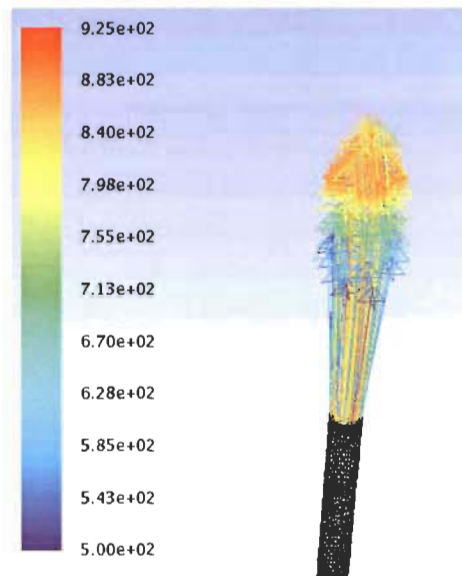


FIGURE 4.37 – Débit de 200 g/s - Vecteur vitesse à la sortie du tube lors de la dispersion de l'hydrogène dans l'air.

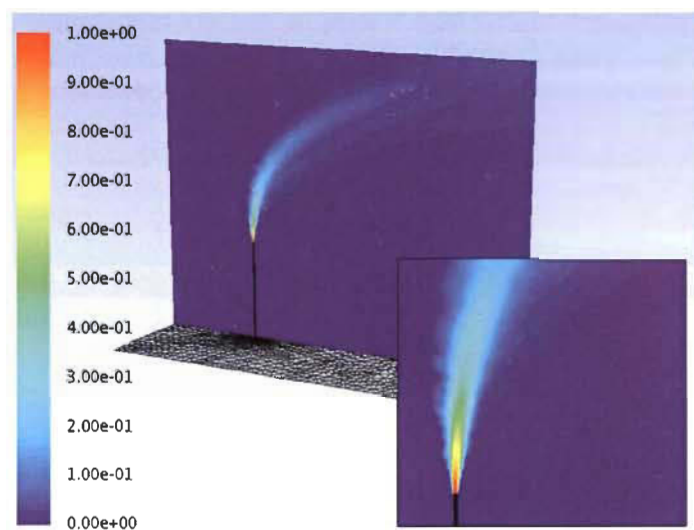


FIGURE 4.38 – Débit de 200 g/s - Distribution de la fraction molaire d'hydrogène sur le plan longitudinal du domaine.

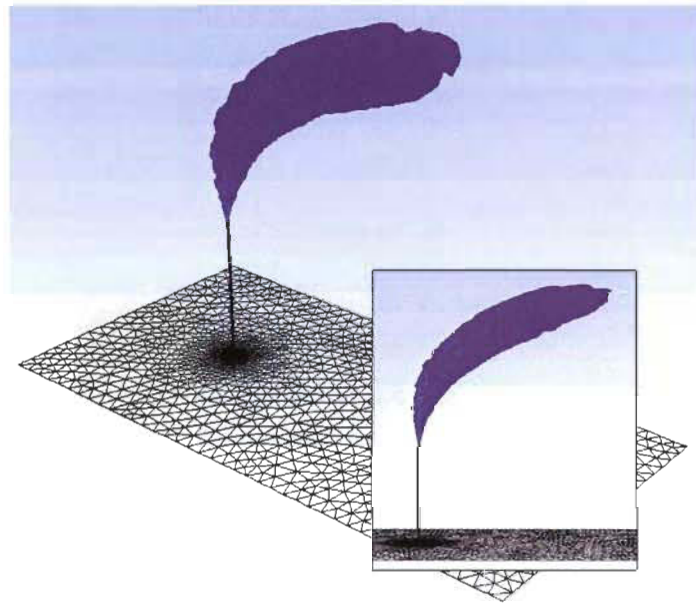


FIGURE 4.39 – Débit de 200 g/s - Représentation du contour de fraction molaire de 4% d'hydrogène.

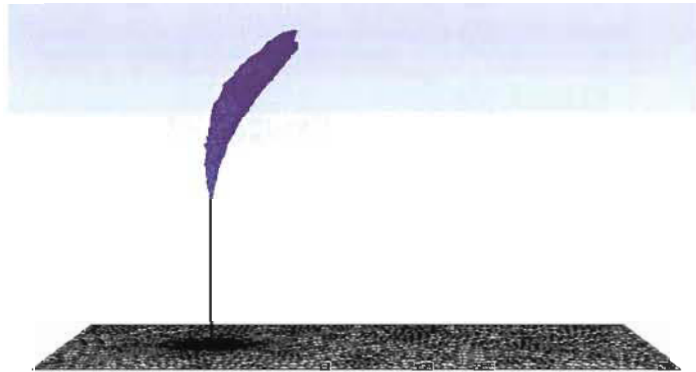


FIGURE 4.40 – Débit de 200 g/s - Représentation du contour de fraction molaire de 9% d'hydrogène.

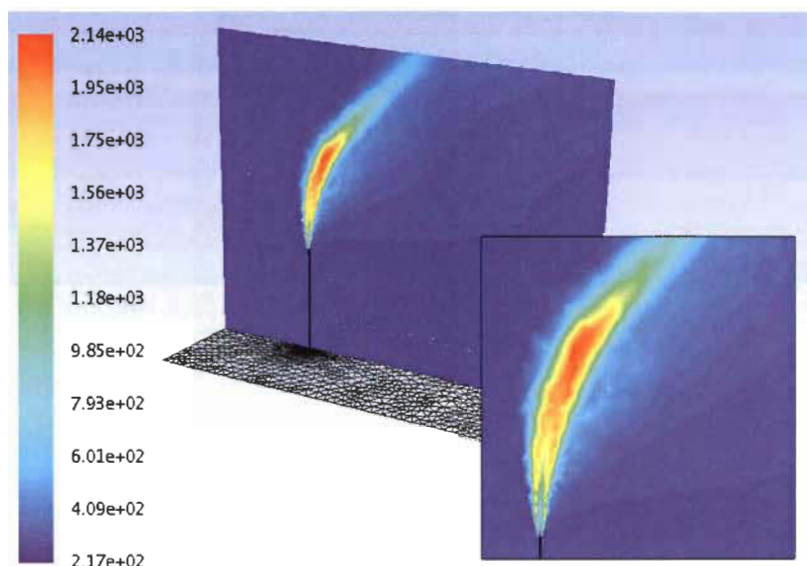


FIGURE 4.41 – Débit de 200 g/s - Profil de température sur le plan longitudinal.

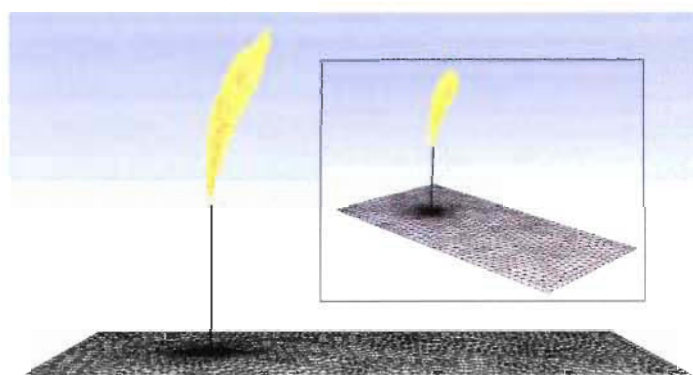


FIGURE 4.42 – Débit de 200 g/s - Contour de température de 1500 K.

4.44 présente sur le plan central, les contours de la radiation incidente de 4 kW/m^2 et 12.6 kW/m^2 .

Le tableau 4.6 présente les dimensions du nuage d'hydrogène pour les contours de fraction molaire de 4% et 9% ainsi que pour le contour de température de 1500 K. La figure 4.45 compare donc les résultats obtenus par FLUENT et le modèle de Chamberlain pour la radiation thermique selon la ligne présentée à la figure 4.6. Enfin, le tableau 4.7 présente pour certaines distances, le pourcentage d'écart (équation 4.1) des valeurs de la radiation thermique obtenues avec FLUENT et le modèle de Chamberlain.

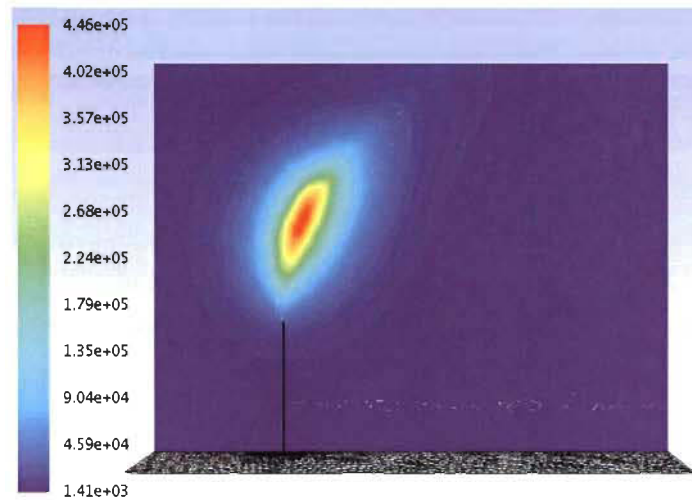


FIGURE 4.43 – Débit de 200 g/s - Profil de la radiation thermique incidente sur le plan longitudinal.

Débit (g/s)	200	Vent (m/s)	4
Diamètre du tube (m)	0.0508	Déviatiion du vent (°)	6
Température ambiante (° C)	7	Type de jet	subsonique
Nuage d'hydrogène (dispersion)			
Fraction molaire (%)	4	L (horizontal) (m)	9.7
		H (vertical) (m)	8.0
	9	L (horizontal) (m)	3.0
		H (vertical) (m)	5.7
Flamme d'hydrogène (combustion)			
Température (K)	1500	L (horizontal) (m)	2.0
		H (vertical) (m)	6.0

TABLE 4.6 – Résultats pour 200 g/s et 2".

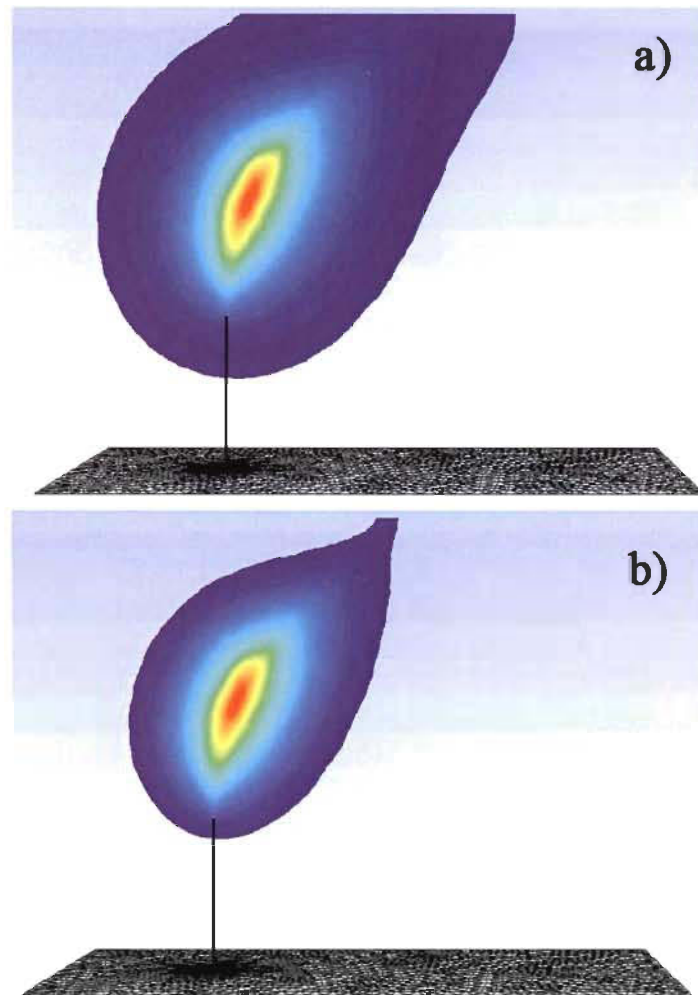


FIGURE 4.44 – Débit de 200 g/s - Contour de radiation thermique incidente de a) 4 kW/m^2 et b) 12.6 kW/m^2 .

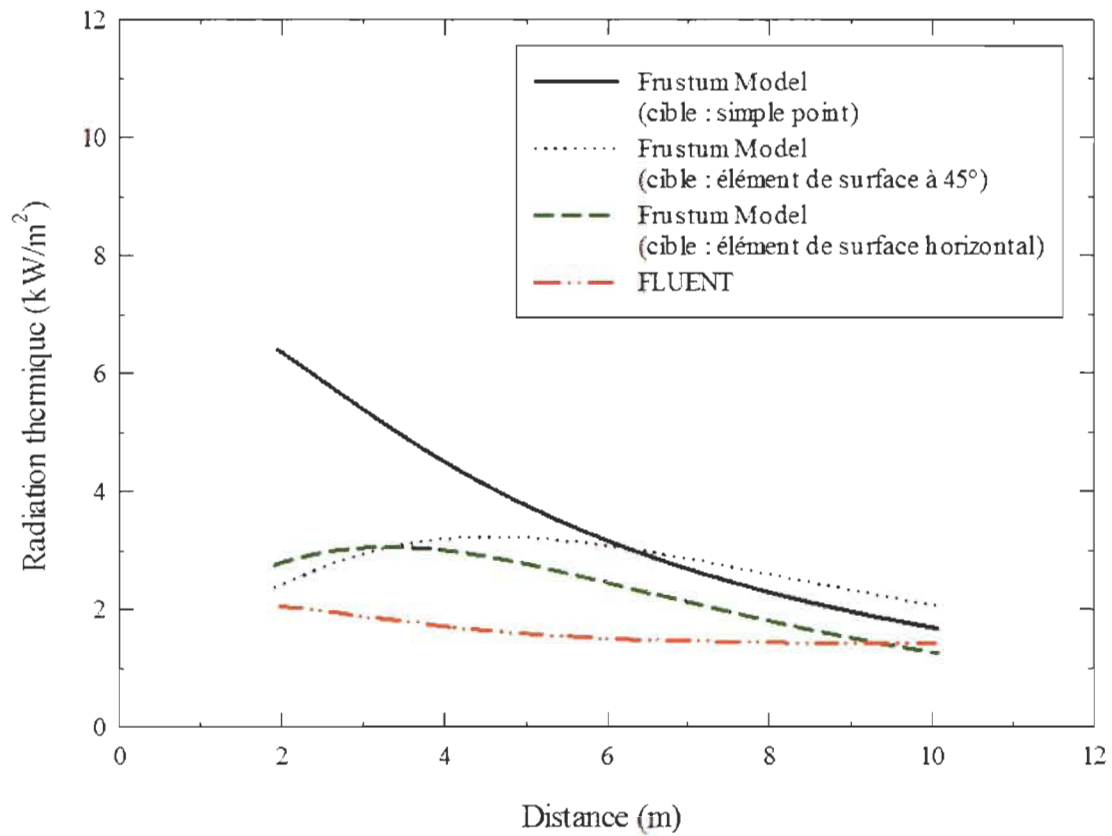


FIGURE 4.45 – Débit de 200 g/s - Résultats de la radiation thermique pour un débit d'hydrogène de 200 g/s.

Distance du tube (m)	Radiation thermique (kW/m^2)				% d'écart		
	Chamberlain (SP)	Chamberlain (ESO)	Chamberlain (ESH)	FLUENT	FLUENT vs Chamberlain (SP)	FLUENT vs Chamberlain (ESO)	FLUENT vs Chamberlain (ESH)
2	6.322	2.444	2.809	2.073	67.2	15.2	26.2
3	5.348	2.967	3.055	1.908	64.3	35.7	37.6
4	4.461	3.209	3.005	1.733	61.2	46.0	42.3
5	3.730	3.221	2.771	1.611	56.8	50.0	41.9
7	2.660	2.851	2.115	1.485	44.2	47.9	29.8
9	1.945	2.320	1.515	1.443	25.8	37.8	4.7

TABLE 4.7 – Pourcentages d'écart pour la radiation thermique à plusieurs distances du tube entre le modèle de Chamberlain et FLUENT pour un débit de 200 g/s (SP : simple point, ESO : élément de surface oblique, ESH : élément de surface horizontal).

Chapitre 5

Conclusion

L'étude réalisée porte sur l'analyse de la radiation thermique émise par une flamme d'hydrogène dans le contexte de torchères présentes dans un milieu venteux. Deux outils de prédiction de la radiation thermique ont été utilisés : un outil analytique et un outil numérique. Nous les avons directement comparés à l'aide de scénarios choisis parmi des mesures expérimentales obtenues par Health & Safety Laboratory (HSL) à Buxton en Angleterre, non accessibles dans ce document. Trois scénarios de jets d'hydrogène subsoniques issus de torchères ont été étudiés. Le premier scénario est une torchère dont le débit d'hydrogène est de 40 g/s en présence d'un vent de 4 m/s. Le second est une torchère dont le débit d'hydrogène est de 80 g/s en présence d'un vent de 5 m/s et enfin, le troisième est une torchère dont le débit d'hydrogène est de 200 g/s en présence d'un vent dont la vitesse est de 4 m/s.

Le premier outil est le modèle analytique de Chamberlain développé en 1987 au centre de recherche de Shell à Thornton. Il est important de rappeler que ce modèle analytique a été développé sur la base de résultats expérimentaux obtenus à partir de gaz d'hydrocarbures. Nous l'avons compilé sous forme d'une application logicielle permettant d'obtenir rapidement la radiation thermique émise par une torchère d'hydrogène en présence de vent. L'application logicielle a été développée de façon à nous fournir trois types de résultats pour chaque scénario étudié. Ces trois types sont directement liés à la cible qui mesure la radiation thermique : la cible est un simple point, la cible est un élément de surface incliné à 45 ° ou la cible est un élément de surface horizontal. Ainsi pour chaque scénario, nous avons obtenu les résultats sur la radiation thermique émise par les différentes torchères.

Le second outil utilisé dans cette étude est entièrement numérique. Les scénarios ont été simulés avec un logiciel commercial de la dynamique des fluides AN-

SYS FLUENT. Avant de simuler les scénarios mentionnés précédemment, nous avons d'abord validé le modèle de combustion de FLUENT en reproduisant des résultats de Barlow et Carter^[7]. Le modèle de turbulence choisi est $k-\epsilon$ réalisable, le modèle « laminaire finite-rate » gère le transport des espèces chimiques et la radiation est calculée grâce au modèle P-1 de FLUENT. La validation ayant donné de bons résultats, nous avons effectués les simulations des 3 scénarios et les résultats obtenus avec FLUENT ont directement été comparés aux résultats obtenus avec le modèle de Chamberlain.

La comparaison montre que les meilleurs résultats sont obtenus entre les simulations réalisées avec FLUENT et le modèle de Chamberlain dans le cas d'une cible représenté par un élément de surface incliné à 45° par rapport à l'horizontal. En effet, les résultats du scénario ayant un débit d'hydrogène de 40 g/s présentent un écart minimum de 3.1% et un écart maximum de 27.5% avec FLUENT. Les résultats du scénario dont le débit est de 80 g/s présentent un écart minimum de 5.5% et un écart maximum de 40.2% avec FLUENT. Enfin, les résultats du scénario ayant un débit d'hydrogène de 200 g/s présentent un écart minimum de 15.2% et un écart maximum de 50% avec FLUENT. Les expériences réalisées par HSL sur lesquels les scénarios sont basés, ont été réalisées en utilisant des capteurs inclinés à 45° ce qui démontre une cohérence avec les résultats obtenus dans cette étude d'autant plus qu'il existe, dans des conditions réelles, une fluctuation du mouvement de la flamme. De façon générale, les deux outils utilisés pour déterminer la radiation thermique issue de torchères d'hydrogène dans un milieu venteux offrent des résultats d'ordre de grandeur similaire. Les modèles concordent davantage lorsque la cible se situe à une distance de 4 m et plus de la torchère.

Bibliographie

- [1] Fluent 12.0 theory guide. *ANSYS FLUENT Documentation*, 2009.
- [2] R.S. Barlow and C.D. Carter. Raman/rayleigh/lif measurements of nitric oxide formation in turbulent hydrogen jet flames. *Combustion and Flame*, 97(3-4) :261 – 280, 1994.
- [3] G. K. Batchelor. An introduction to fluid dynamics. *Cambridge Univ. Press*, Cambridge, England, 1967.
- [4] P. Bénard. Finite volume simulations of hydrogen flares. *The HyFlare Program*, page 38, 2007.
- [5] Association Française de l’Hydrogène. Mémento de l’hydrogène. *AFH2*, 2008.
- [6] W.F.J.M Engelhard. Chap.6 heat flux from fire. *Yellow Book*, Yellow Book :6.1 – 6.132, 2005.
- [7] W.G. Houf, G.H. Evans, and R.W. Schefer. Analysis of jet flames and unignited jets from unintended releases of hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(14) :5961 – 5969, 2009. 2nd International Conference on Hydrogen Safety, 2nd International Conference on Hydrogen Safety.
- [8] Mustafa Ilbas. The effect of thermal radiation and radiation models on hydrogen-hydrocarbon combustion modelling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 30(10) :1113 – 1126, 2005.
- [9] College of the desert. Hydrogen properties. *Hydrogen Fuel Cell Engines and Related Technologies*, 2001.
- [10] S. Patej. Formalisation du savoir et des outils dans le domaine des risques accidentels (dra-35), omega-8, feu torche. *Institut national de l’environnement industriel et des risques (INERIS)*, 2003.
- [11] S. Sarkar and L. Balakrishnan. Application of a reynolds-stress turbulence model to the compressible shear layer. *ICASE Report 90-18, NASA CR 182002*, 1990.

- [12] C. Guedes Soares and A. P. Teixeira. Probabilistic modelling of offshore fires. *Fire Safety Journal*, 34(1) :25 – 45, 2000.

Annexe A

Configuration de FLUENT

Cette annexe a pour objectif de présenter les différentes étapes effectuées lors de la configuration de FLUENT pour cette étude. Des captures d'écran viendront illustrer les explications.

A.1 Configuration générale

La première étape consiste à importer le fichier « .mesh » qui contient la géométrie, le maillage et la définition des différentes frontières du domaine. Ce fichier a été précédemment extrait du module de maillage fourni avec ANSYS FLUENT : « Meshing ». Une fois importé, une première boîte de dialogue présentée à la figure A.1 permet de :

- Vérifier la cohérence et la qualité du maillage,
- Choisir le type de solveur, qui est le « pressure-based » dans notre cas,
- Sélectionner le type de régime, ici stationnaire,
- Définir l'accélération gravitationnelle selon notre géométrie.

A.2 Choix des modèles

L'étape suivante consiste à sélectionner les différents modèles utilisés lors des simulations. Pour la création du vent et la dispersion de l'hydrogène, le menu résumant les modèles est présenté à la figure A.2.

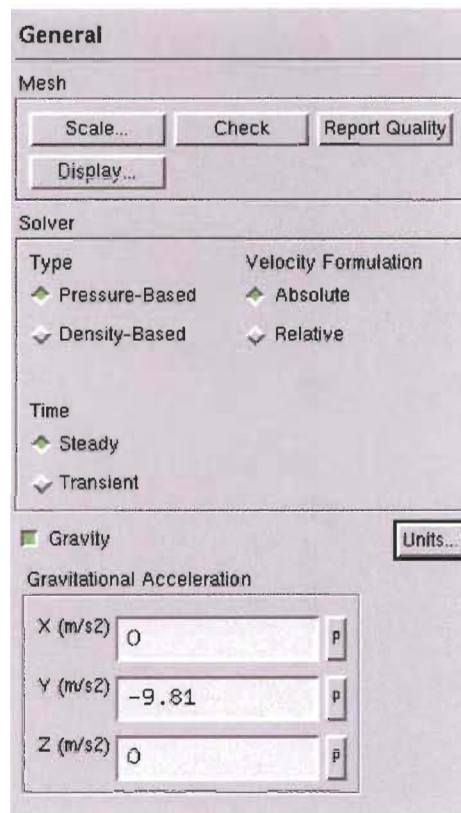


FIGURE A.1 – Paramètres généraux de FLUENT.

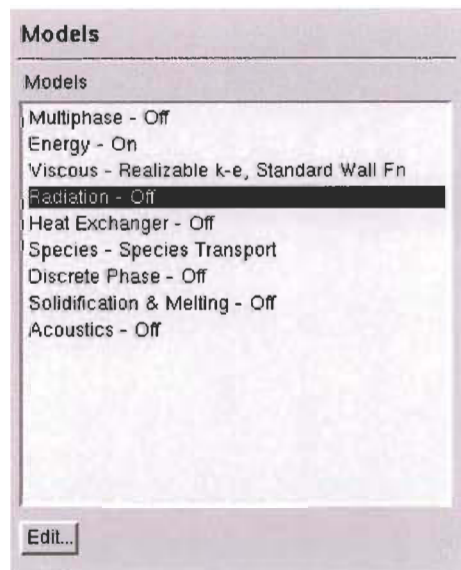


FIGURE A.2 – Menu permettant d'accéder aux différents modèles de FLUENT.

L'équation d'énergie doit être activée (figure A.3) et le modèle de turbulence $k-\epsilon$ réalisable est sélectionné comme le montre la figure A.4.

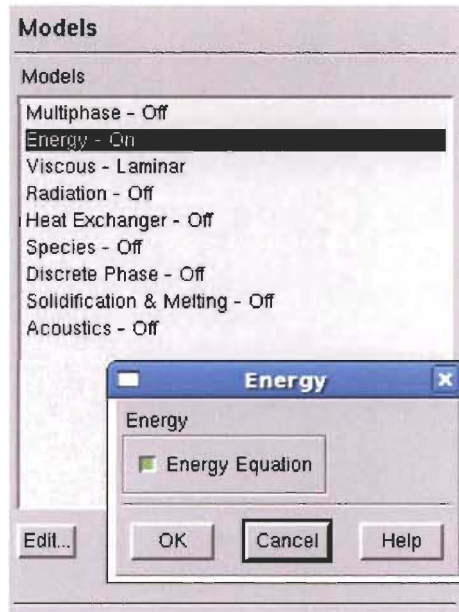


FIGURE A.3 – Activation de l'équation d'énergie.

Enfin, le modèle de transport des espèces est activé et le mélange hydrogène-air est choisi afin de travailler avec toutes les espèces chimiques adéquates. La figure A.5 présente la boîte de dialogue paramétrée pour le vent et la dispersion du nuage d'hydrogène. Une fois le nuage d'hydrogène établi et en état stationnaire, l'allumage se fait en activant la réaction volumétrique comme le montre la figure A.6. C'est à cette même étape que le modèle de radiation P-1 est activé (figure A.7). Finalement, la boîte de dialogue résumant les modèles utilisés pour nos simulations est mise à jour et est présentée à la figure A.8.

La figure A.9 présente le menu de configuration des espèces chimiques où chacune d'elle sera traitée comme étant un gaz idéal. C'est aussi dans ce menu que les coefficients d'absorption et de diffusion sont paramétrés lors de l'activation du modèle de radiation.

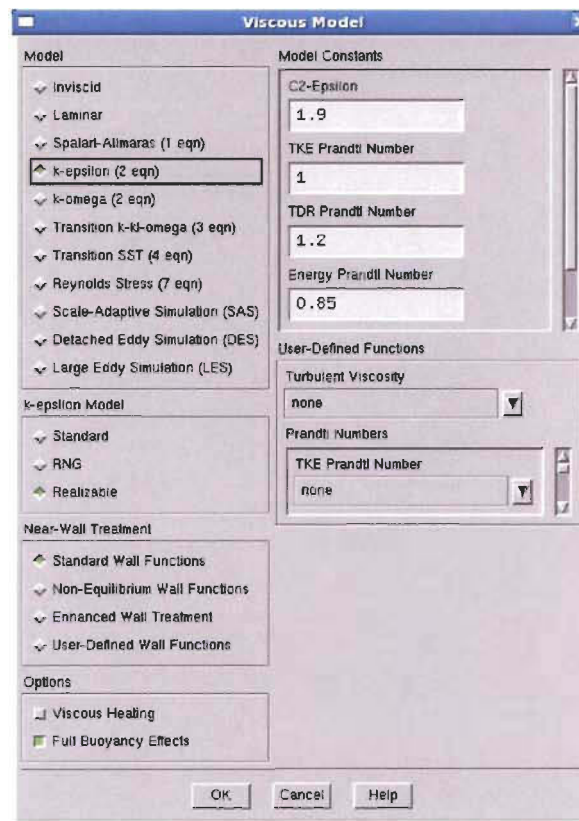
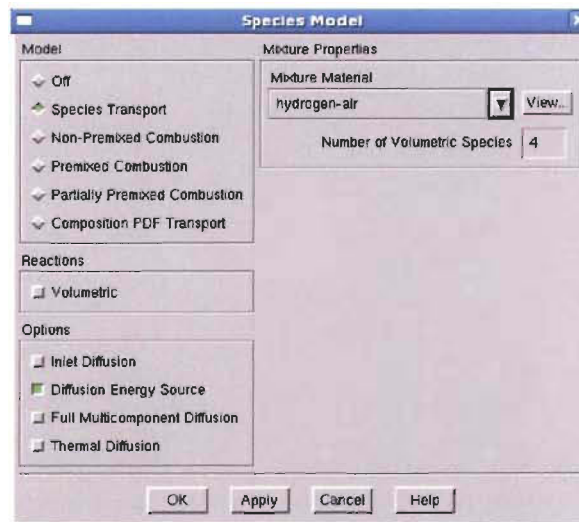
FIGURE A.4 – Sélection du modèle de turbulence k - ϵ réalisable.

FIGURE A.5 – Traitement des espèces chimiques lors de la dispersion de l'air et de l'hydrogène.

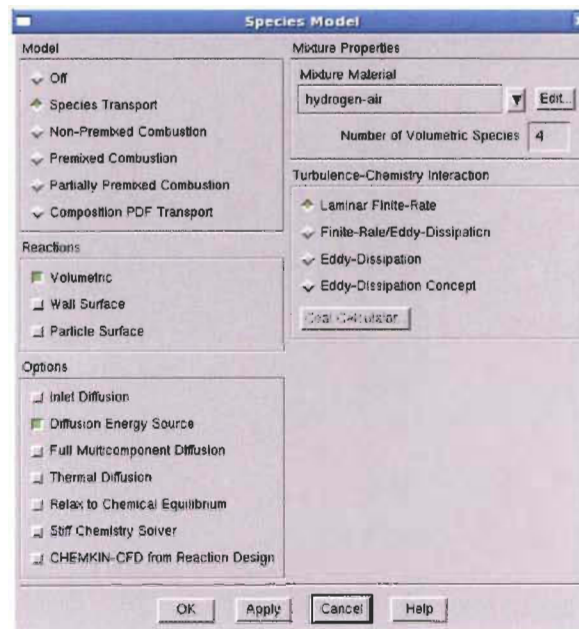


FIGURE A.6 – Traitement des espèces chimiques lors de la combustion de l'hydrogène dans l'air.



FIGURE A.7 – Activation du modèle de radiation P-1.

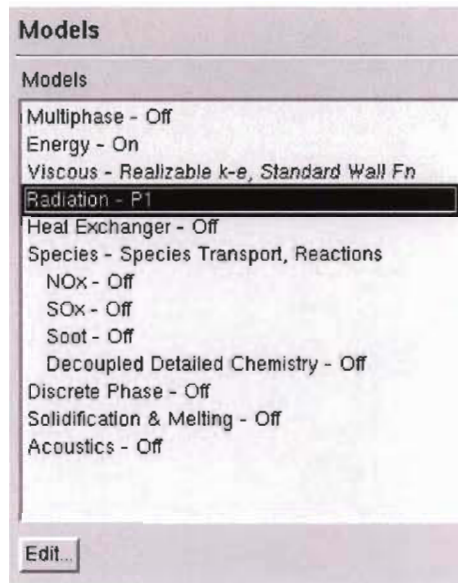


FIGURE A.8 – Modèles choisis lors de la combustion de l'hydrogène dans l'air.

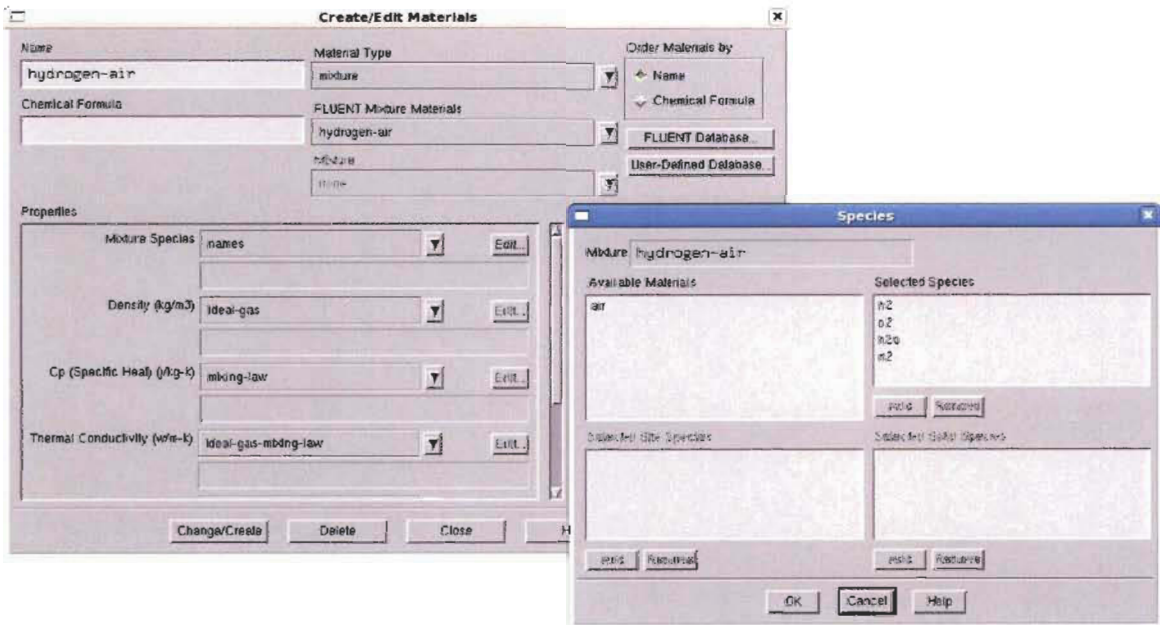


FIGURE A.9 – Propriétés des espèces chimiques utilisées lors des simulations.

A.3 Conditions frontières

La prochaine étape consiste à configurer les différentes conditions frontières listées dans la boîte de dialogue de la figure A.10. Trois types de conditions frontières sont utilisés dans cette étude :

- « pressure outlet » : utilisé pour les frontières ouvertes du domaine à l'exception de celle où le vent s'engouffre dans le domaine. Les paramètres de ces frontières sont présentés à la figure A.11.
- « mass flow inlet » : utilisé pour la frontière qui génère le vent dans le domaine (figure A.12) et pour le trou par lequel l'hydrogène sort du tube (figure A.13). Ces frontières sont caractérisées par la présence d'un débit de gaz.
- « wall » : utilisé pour les frontières solides comme le tube et les sols. Les paramètres par défaut de FLUENT sont conservés.

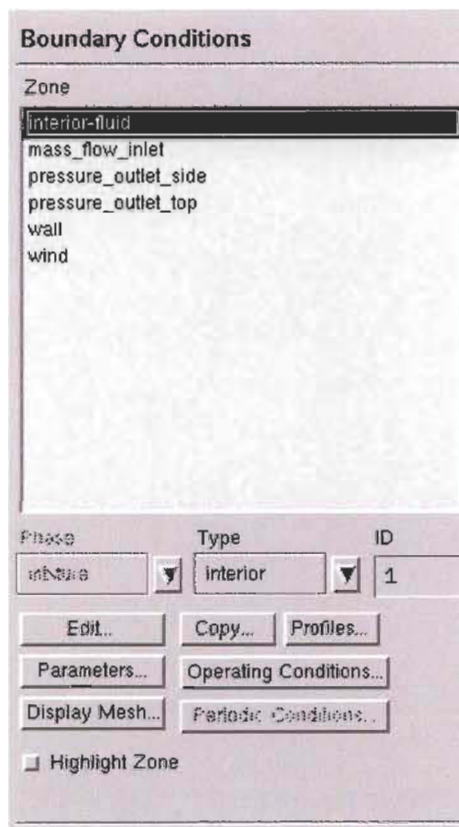


FIGURE A.10 – Présentation des différents types de frontières du domaine.

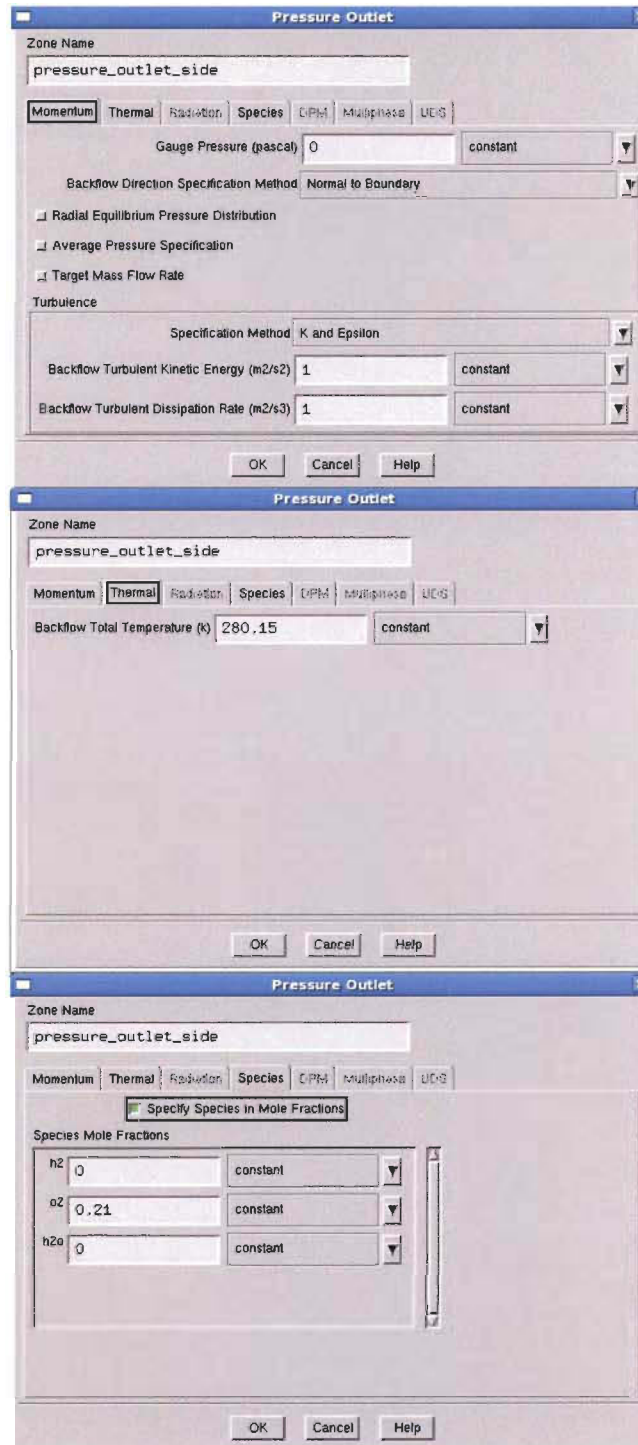


FIGURE A.11 – Configuration des frontières définies comme « pressure outlet ».

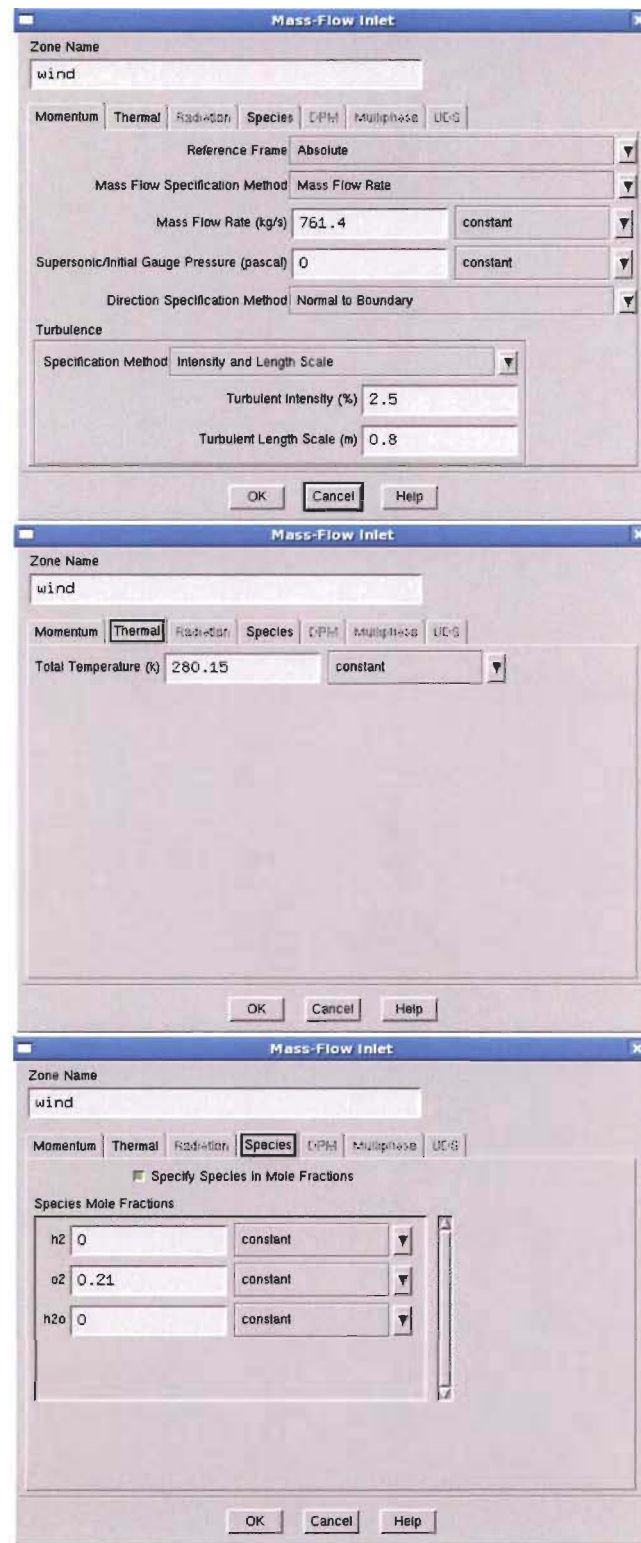


FIGURE A.12 – Configuration de la frontière générant le vent dans le domaine définie comme « mass flow inlet ».

The figure displays three sequential screenshots of the 'Mass-Flow Inlet' dialog box in FLUENT, illustrating the configuration for a hydrogen inlet. The 'Zone Name' is consistently 'mass_flow_inlet' across all three.

Top Screenshot (Momentum Tab):

- Momentum:** Reference Frame: Absolute; Mass Flow Specification Method: Mass Flow Rate; Mass Flow Rate (kg/s): 0.04 (constant); Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal): 0 (constant); Direction Specification Method: Normal to Boundary.
- Turbulence:** Specification Method: Intensity and Length Scale; Turbulent Intensity (%): 3; Turbulent Length Scale (m): 0.001778.

Middle Screenshot (Thermal Tab):

- Thermal:** Total Temperature (K): 273 (constant).

Bottom Screenshot (Species Tab):

- Species:** Specify Species in Mole Fractions (checked).
- Species Mole Fractions:**

Species	Mole Fraction	Units
h2	1	constant
o2	0	constant
h2o	0	constant

FIGURE A.13 – Configuration du débit d'hydrogène défini comme « mass flow inlet ».

A.4 Gestion de la simulation

Par la suite, les paramètres de discrétisation temporelle et spatiale sont choisis. Par défaut, ces paramètres sont au premier ordre (figure A.14). Les valeurs des paramètres de contrôle de la solution sont présentées à la figure A.15. Paramétrés relativement faibles au début de la simulation pour faciliter la convergence, ils sont peu à peu augmentés afin d'accélérer la simulation jusqu'à l'obtention d'un état stationnaire.

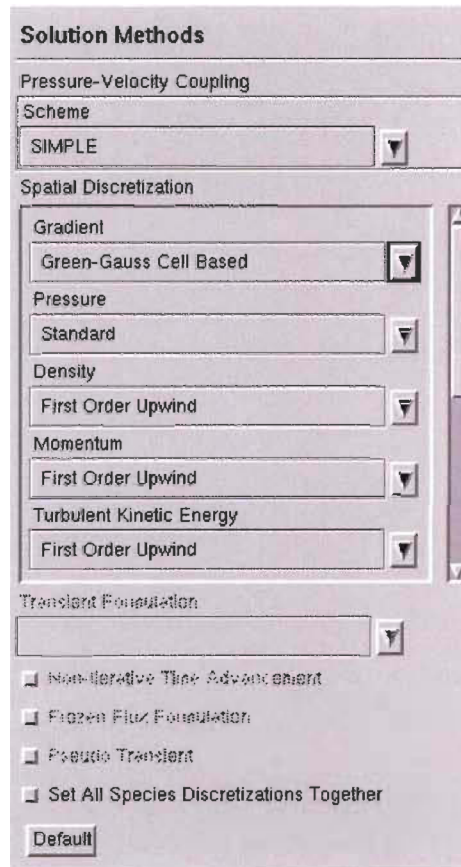


FIGURE A.14 – Paramètres de discrétisation temporelle et spatiale.

Enfin, les moniteurs présentant les résiduels (et tout autre paramètre choisi) pendant le calcul de la solution ainsi que les critères de convergence sont paramétrés dans les boîtes de dialogue présentées à la figure A.16.

Avant le lancement de la simulation, le système doit être initialisé comme le montre la figure A.17. Finalement, la simulation est démarrée avec un nombre d'itérations choisi comme le montre la figure A.18.

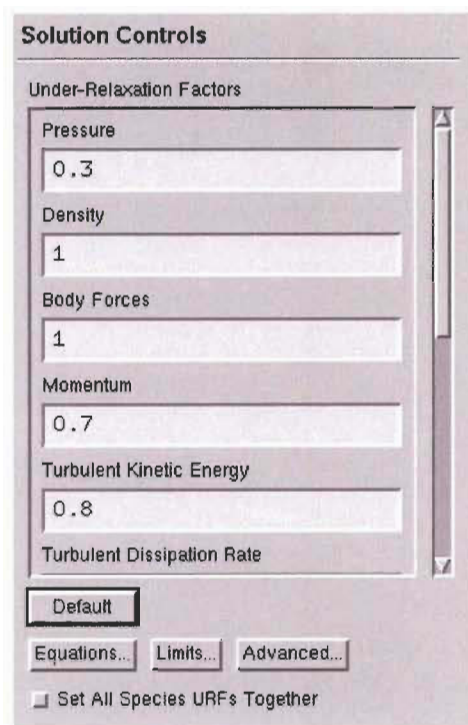


FIGURE A.15 – Paramètres de contrôle de la solution.

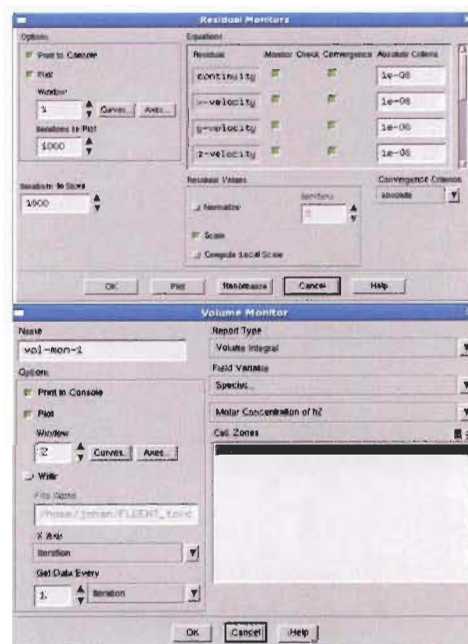


FIGURE A.16 – Zone de définition des critères de convergence et de l'affichage moniteur en temps réel.

The image shows the 'Solution Initialization' dialog box in FLUENT. It contains several sections: 'Initialization Methods' with radio buttons for 'Hybrid Initialization' and 'Standard Initialization'; 'Compute from' with a dropdown menu set to 'all-zones'; 'Reference Frame' with radio buttons for 'Relative to Cell Zone' and 'Absolute'; and 'Initial Values' with input fields for 'Gauge Pressure (pascal)', 'X Velocity (m/s)', 'Y Velocity (m/s)', 'Z Velocity (m/s)', 'Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)', and 'Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)'. At the bottom, there are buttons for 'Initialize', 'Reset', 'Patch...', 'Reset DPM Sources', and 'Reset Statistics'.

Solution Initialization

Initialization Methods

☐ Hybrid Initialization

☒ Standard Initialization

Compute from

all-zones

Reference Frame

☒ Relative to Cell Zone

☐ Absolute

Initial Values

Gauge Pressure (pascal)

0

X Velocity (m/s)

0

Y Velocity (m/s)

0

Z Velocity (m/s)

0

Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)

0.01620717

Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)

0.6499899

Initialize Reset Patch...

Reset DPM Sources Reset Statistics

FIGURE A.17 – Zone d'initialisation de la simulation.

The image shows the 'Run Calculation' dialog box in FLUENT. It contains buttons for 'Check Case...' and 'Preview Mesh Motion...'. Below these are input fields for 'Number of Iterations' (set to 20000) and 'Reporting Interval' (set to 1), both with up and down arrow controls. There is also a 'Profile Update Interval' input field set to 1. At the bottom, there are buttons for 'Data File Quantities...', 'Acoustic Signals...', and a large 'Calculate' button.

Run Calculation

Check Case... Preview Mesh Motion...

Number of Iterations Reporting Interval

20000 1

Profile Update Interval

1

Data File Quantities... Acoustic Signals...

Calculate

FIGURE A.18 – Choix du nombre d'itérations et démarrage de la simulation.